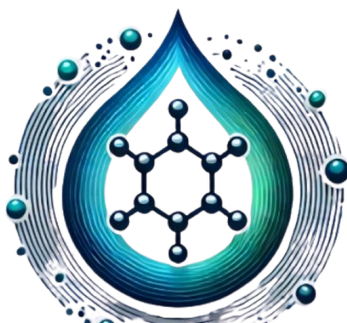




CROMA SCIENCE

Simulação e processamento de cromatografia líquida
HPLC · ARC · UPLC

Manual de operação — versão 1.4

Sumário

1. O que o programa faz e o que não faz
2. Instalação, primeiro acesso e licença
3. A janela e a ajuda em cada campo
4. Roteiro rápido: do zero ao resultado
5. Tela Início: projetos
6. Tela Projeto
7. Método de instrumento
8. Soluções: o conteúdo do frasco
9. Executar amostras
10. Método de processamento e method set
11. Revisar dados
12. Desenvolver método
13. Biblioteca de compostos e colunas
14. Dados reais do Empower: importar e exportar
15. Administração, usuários e auditoria
16. Tabelas de referência
17. Problemas comuns
18. Limites do modelo

1. O que o programa faz e o que não faz

O Croma Science é um laboratório virtual de cromatografia líquida. Ele tem três usos:

- **Desenvolver métodos:** você escolhe coluna, fase móvel, gradiente, temperatura e detector e vê, na hora, o cromatograma que o modelo prevê. Serve para decidir o que vale a pena testar na bancada antes de gastar solvente e coluna.
- **Treinar:** o fluxo de trabalho segue o dos sistemas de dados cromatográficos (projeto, métodos, sample set, revisão, resultados, assinatura), com um instrumento virtual no lugar do equipamento.
- **Processar dados reais:** cromatogramas exportados do Empower (ARW/TXT, AIA/ANDI .cdf ou a pasta de backup de projeto) são integrados, identificados, quantificados e relatados aqui. Eles podem ser importados à mão ou sozinhos, por uma **pasta vigiada** (capítulo 14).
- **Registrar o sinal de um detector:** uma caixa conversora A/D ligada à USB lê a saída analógica do detector e o contato de injeção, e o programa grava o cromatograma (capítulo 9).

O programa não controla equipamento. A tela *Executar amostras* **não comanda** sistemas Waters (Alliance, Arc, ACQUITY) nem nenhum outro cromatógrafo: as abas *Injeção única* e *Sample set* fazem corridas **simuladas**. Comandar bomba, injetor e detector reais exige os drivers proprietários e a licença do fabricante, que não fazem parte deste programa. Dados de equipamento real entram de duas maneiras: por **importação de arquivos** (capítulo 14) ou pelo **registro do sinal analógico** do detector com uma caixa A/D (capítulo 9), que só lê o sinal.

A simulação é um modelo. Ela mostra para que lado cada mudança empurra a separação, e não substitui a corrida real nem a validação do método. O programa não foi validado para uso regulado (21 CFR Part 11, RDC 658). Veja o capítulo 18.

O Croma Science é um programa original. Empower, Alliance, Arc e ACQUITY UPLC são marcas da Waters Corporation, citadas apenas para indicar compatibilidade de arquivos.

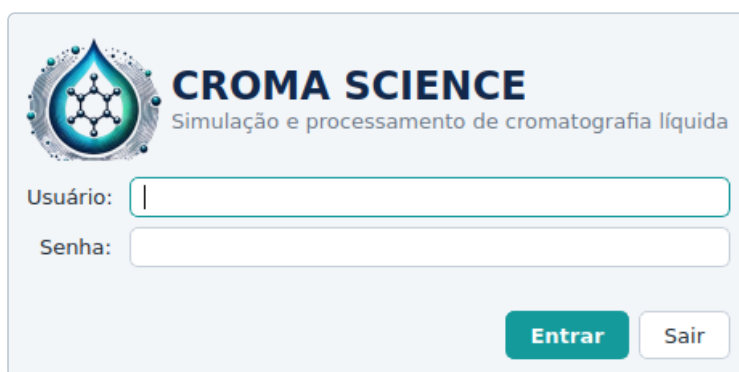
2. Instalação, primeiro acesso e licença

Instalação

Execute `Setup_CromaScience_1.4_Win64.exe`. O instalador não baixa nada da internet e não pede administrador. Funciona no Windows 7 SP1, 8, 8.1, 10 e 11 de 64 bits. Se aparecer “O Windows protegeu o computador”, clique em *Mais informações* e em *Executar assim mesmo*. Quem já tem uma versão anterior pode instalar por cima: os projetos são mantidos e a biblioteca recebe os compostos e colunas novos sem apagar os que você cadastrou.

Primeiro acesso

Na primeira vez, o programa pede para criar o **administrador**: nome completo, usuário e senha (mínimo de 6 caracteres). Marque *Criar um projeto de exemplo* para já ter dados com que praticar. Nas próximas vezes aparece a tela de entrada.

A imagem mostra a tela de login do software Croma Science. No topo à esquerda, há um ícone de uma gota azul com uma estrutura molecular dentro. À direita do ícone, o texto "CROMA SCIENCE" está em letras maiúsculas e negrito, com o subtítulo "Simulação e processamento de cromatografia líquida" em uma fonte menor e cinza. Abaixo disso, há dois campos de entrada: "Usuário:" com um ícone de lupa e "Senha:" com um ícone de olho desativado. Ambos os campos são retangulares com bordas arredondadas. Na parte inferior direita, há dois botões: "Entrar" em verde com texto branco e "Sair" em cinza claro com texto cinza.

Tela de entrada. Cinco senhas erradas seguidas bloqueiam a conta; o administrador desbloqueia.

Licença

Sem chave, o programa funciona por **30 dias com todas as funções**. Depois disso, é preciso ativar. Em **Administração** ► **Licença...**:

1. Copie o **código deste computador** (botão **Copiar código**) e envie ao fornecedor.
2. Cole a **chave de ativação** recebida (começa com **CS-**) ou abra o arquivo **.lic**.
3. Clique em **Ativar**.

Como comprar. Fale com o **Grupo Lume**: WhatsApp **(85) 9 8518-3783** ou e-mail **franklin.conrado@gmail.com**; pagamento por Pix (chave e-mail: franklin.conrado@gmail.com). Na janela de licença, escolha a **Edição** e clique em **Comprar pelo WhatsApp** (ou **Pedir por e-mail**): a mensagem já sai com o código deste computador. Depois do pagamento você recebe a chave de ativação.


Croma Science
Período de teste: restam **29** dia(s), com todas as funções.

Como comprar fale com o **Grupo Lume:**
 WhatsApp **(85) 9 8518-3783** · e-mail **franklin.conrado@gmail.com**
 Pagamento por Pix (chave e-mail): **franklin.conrado@gmail.com**

Edição: Completa ▾
Comprar pelo WhatsApp
Pedir por e-mail

A mensagem já leva o código deste computador. Depois do pagamento, você recebe a chave de ativação para colar abaixo.

1. Envie este código ao fornecedor

JTWC-PDP5-D4AQ-I5LK
Copiar código

O código identifica só este computador. A chave que você receber vale apenas nele.

2. Cole aqui a chave recebida

CS-XXXXX-XXXXX-XXXXX-...

Abrir arquivo de licença (.lic)...
Ativar
Continuar testando

Janela de licença.

A chave vale para um computador e não precisa de internet para ser conferida. Há duas edições:

Edição	O que inclui
Básica	Simulação com detector UV/Vis, desenvolvimento de método (editor resumido e completo), aquisição virtual, processamento, curvas, adequação do sistema e relatórios em PDF.
Completa	Tudo da Básica mais: detectores PDA, fluorescência, índice de refração e ELSD; importar e exportar arquivos do Empower (ARW, AIA e backup de projeto); importação automática por pasta vigiada; aquisição real pela caixa A/D; mapa de resolução e transferência de método; assinatura eletrônica; planilha Excel e resumo do lote.

3. A janela e a ajuda em cada campo

À esquerda fica a **navegação**, com as sete telas. Embaixo dela aparecem o projeto aberto, a situação da licença, o usuário da sessão e os botões **Manual (F1)** e **Sair da sessão**. As telas *Projeto*, *Executar amostras* e *Revisar dados* só abrem com um projeto aberto.

CROMA SCIENCE
Simulação e processamento de HPLC, ARC e UPLC · versão 1.3
Olá, **Breno Carvalho** (Administrador).

Projetos

Projeto	Descrição	Injeções	Resultados	Última atualização
Exemplo — Parabens	Projeto de demonstração criado pelo...	16	16	07/10/2026 21:21

Como trabalhar

- 1. Projeto** — crie um projeto; nele ficam métodos, soluções, dados e resultados.
- 2. Desenvolver método** — escolha coluna, fase móvel e gradiente e veja o cromatograma previsto.
- 3. Projeto ▶ Soluções** — diga o que há em cada frasco (padrões, amostras, branco).
- 4. Executar amostras** — injeção única ou sample set; o instrumento virtual adquire os canais.
- 5. Revisar dados** — integre, monte a tabela de componentes, calibre e quantifique.
- 6. Projeto ▶ Resultados** — relatórios em PDF, planilha Excel e assinatura eletrônica.

Dados reais do Empower: em Projeto, use *Importar do Empower* (ARW, AIA .cdf ou backup de projeto) e processe do mesmo jeito.

Últimas ações

Quando	Usuário	Resultado
07/10/2026 21:21	breno	Resultados
07/10/2026 21:21	breno	Resultados
07/10/2026 21:21	breno	Resultados

Projeto aberto: **Exemplo — Parabens**
Teste: 30 dia(s) restante(s)
Breno Carvalho
Administrador · breno

Manual (F1) Sair da sessão

Abrir projeto + Novo projeto Criar projeto de exemplo Arquivar / reabrir ☐ Mostrar arquivados

Tela inicial, com a navegação à esquerda.

Ajuda em cada campo. Deixe o mouse parado um instante em cima de qualquer campo, botão, lista ou tabela: aparece uma caixa dizendo o que ele é e para que serve. Os nomes das telas, na navegação, também têm explicação. A tecla **F1** abre este manual de qualquer tela.

Convenções

- Os números usam **vírgula decimal**. Nos campos com setas, a roda do mouse não altera o valor (evita mudanças sem querer).
- Nas tabelas, dois cliques numa linha abrem o item. Para selecionar várias linhas, use **Ctrl** ou **Shift**.
- Nas listas longas (colunas, compostos) dá para **digitar um pedaço do nome** e escolher entre os que combinam.
- Nos gráficos: arrastar amplia, dois cliques voltam ao todo, **Shift** + arrastar desloca.
- Sempre que algo já gravado é alterado, o programa pede o **motivo**, que vai para a trilha de auditoria.

4. Roteiro rápido: do zero ao resultado

Este roteiro leva de um projeto vazio a um resultado quantificado. Cada passo é detalhado nos capítulos seguintes.

1. Crie o projeto. *Início* ► . Dê um nome e abra.

2. Encontre as condições. *Desenvolver método*: clique em e escolha os compostos; escolha sistema e coluna; escolha uma *predefinição de fase móvel*; ajuste as porcentagens até a **resolução crítica** ficar acima de 2,0 e a pressão dentro do limite.

3. Salve o método de instrumento. Ainda em *Desenvolver método*:

.

4. Cadastre as soluções. *Projeto* ► aba *Soluções* ► : uma para cada nível de padrão e uma para cada amostra, com os compostos e as concentrações. Para o branco não é preciso cadastrar nada: existe o frasco pronto (**Branco: só fase móvel**).

5. Monte e rode a fila. *Executar amostras* ► aba *Sample set*: uma linha por frasco, com a solução, a função (Branco, Padrão, Amostra, Controle) e o método. Clique em

.

6. Crie o método de processamento. *Revisar dados* ► , com um padrão aberto: ajuste a integração, clique em *Preencher pelo canal de referência* para preencher a tabela de componentes e salve.

7. Processe. *Projeto* ► aba *Canais*: selecione os canais do sample set ► ► marque *Refazer as curvas*.

8. Confira e relate. *Projeto* ► abas *Resultados* e *Curvas*; , ou .

Para que os resultados saiam prontos no fim da fila, junte o método de instrumento e o de processamento num **method set** (capítulo 10) e use o method set nas linhas do sample set. O projeto de exemplo já vem assim.

5. Tela Início: projetos

Lista os projetos e as últimas ações registradas. Um **projeto** guarda tudo o que pertence a um trabalho: métodos, soluções, injeções, dados brutos, resultados, curvas e a sua trilha de auditoria.

Botão	O que faz
Abrir projeto	Abre o projeto selecionado (dois cliques fazem o mesmo).
+ Novo projeto	Cria um projeto vazio. Só o administrador.
Criar projeto de exemplo	Cria um projeto pronto de doseamento de parabenos, com métodos, soluções, uma fila já adquirida, curva e resultados.
Arquivar / reabrir	Projeto arquivado fica só para consulta.
Mostrar arquivados	Inclui os arquivados na lista.

6. Tela Projeto

Reúne tudo o que há no projeto aberto, em oito abas. No alto ficam o nome do projeto e os botões **Importar do Empower...** e **Importação automática...** (capítulo 14).

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Exemplo — Parabenos

Projeto

Filtrar: Todos os sample sets

Importar do Empower...

Importação automática...

Sample sets

Injeções

Canais

Métodos

Soluções

Resultados

Curvas

Auditoria do projeto

Amostra	Frasco	Inj.	Função	Nível	Canal	Unid.	Pontos	Duração (min)	Sample set
Creme lote 02	8	2	Amostra		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 02	8	2	Amostra		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 02	8	1	Amostra		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 02	8	1	Amostra		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 01	7	2	Amostra		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 01	7	2	Amostra		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 01	7	1	Amostra		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Creme lote 01	7	1	Amostra		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	6	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	6	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	5	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	5	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	4	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	4	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	3	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	3	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	2	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	2	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	1	Controle		PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par
Adequação (N3)	4	1	Controle		PDA 254 nm @ 4.8 nm	AU	6001	10,00	Doseamento de par
Padrão MS	6	1	Padrão	5	PDA 210-400 nm, 1.2 nm ...	AU	2001	10,00	Doseamento de par

Revisar

Processar...

Exportar canais...

Selecione vários com Ctrl ou Shift.

Duplo clique abre na revisão.

Aba Canais: os dados brutos, um canal por detector e por injeção.

Aba	Conteúdo e botões
Sample sets	Filas já executadas, com estado e número de injeções. <i>Ver canais deste sample set</i> filtra a aba Canais.
Injeções	Todas as injeções, simuladas ou importadas. <i>Alterar dados da amostra...</i> corrige função, nível, peso, diluição e as quantidades dos padrões (com motivo, na auditoria).
(barra de cima)	<i>Importar do Empower...</i> lê arquivos escolhidos à mão; <i>Importação automática...</i> liga a pasta vigiada (capítulo 14).
Canais	Dados brutos. Selecione um ou vários e use <i>Revisar</i> (abre em Revisar dados), <i>Processar...</i> (aplica um método de processamento a todos de uma vez) ou <i>Exportar canais...</i> (ARW ou AIA).
Métodos	Métodos de instrumento, de processamento e method sets. + <i>Novo método</i> , <i>Abrir / editar</i> , <i>Histórico de versões</i> .
Soluções	Conteúdo dos frascos usados na simulação (capítulo 8).
Resultados	Resultados gravados, com versão. Relatório em PDF, resumo do lote, planilha Excel e assinatura.
Curvas	Curvas de calibração por componente: pontos, equação, R² e resíduos.
Auditoria do projeto	Trilha de auditoria só deste projeto, com filtro e exportação em PDF.

**CROMA
SCIENCE**

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Exemplo — Parabenos

Projeto

Filtrar: Todos os sample sets

Importar do Empower...

Importação automática...

Sample sets

Injeções

Canais

Métodos

Soluções

Resultados

Curvas

Auditoria do projeto

Nº	Amostra	Inj.	Função	Canal	Versão	Método	Picos	Identificados	Adequação
1	Creme lote 02	2	Amostra	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	3	3	Aprovada
2	Creme lote 02	1	Amostra	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	3	3	Aprovada
3	Creme lote 01	2	Amostra	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	2	2	Aprovada
4	Creme lote 01	1	Amostra	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	2	2	Aprovada
5	Adequação (N3)	6	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
6	Adequação (N3)	5	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
7	Adequação (N3)	4	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
8	Adequação (N3)	3	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
9	Adequação (N3)	2	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
10	Adequação (N3)	1	Controle	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
11	Padrão N5	1	Padrão	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
12	Padrão N4	1	Padrão	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
13	Padrão N3	1	Padrão	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
14	Padrão N2	1	Padrão	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
15	Padrão N1	1	Padrão	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	4	4	Aprovada
16	Branco	1	Branco	PDA 254 nm @ 4.8 nm	1	Parabenos — doseamento	0	0	—

Abrir na revisão

Relatório (PDF)...

Resumo do lote (PDF)...

Planilha (Excel)...

Assinar...

Mostrar todas as versões

Pronto

Aba Resultados.

**CROMA
SCIENCE**

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Exemplo — Parabenos

Projeto

Filtrar: Todos os sample sets

Importar do Empower...

Importação automática...

Sample sets

Injeções

Canais

Métodos

Soluções

Resultados

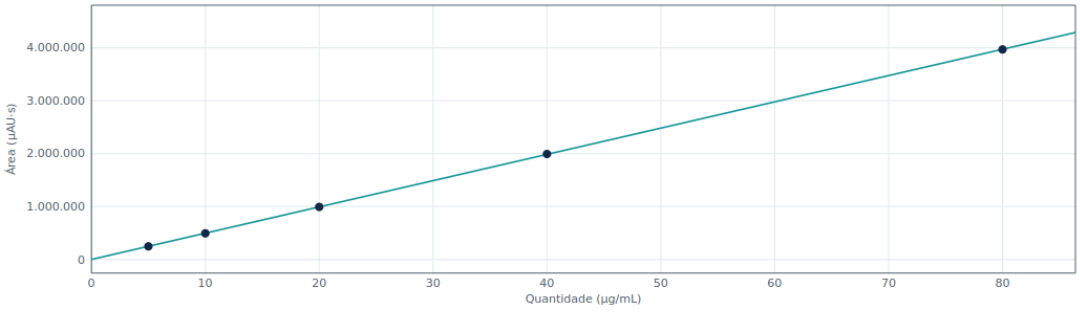
Curvas

Auditoria do projeto

Método	Componente	Versão	Ajuste	Equação	R²	Pontos
Parabenos — doseamento	Butilparabeno	1	Linear (Nenhum)	$y = 49609 \cdot x + 1847.24$	0,999993	5 5,000 a t
Parabenos — doseamento	Etilparabeno	1	Linear (Nenhum)	$y = 56882.1 \cdot x + 2895.9$	0,999993	5 5,000 a t
Parabenos — doseamento	Metilparabeno	1	Linear (Nenhum)	$y = 62132.4 \cdot x + 3495.14$	0,999992	5 5,000 a t
Parabenos — doseamento	Propilparabeno	1	Linear (Nenhum)	$y = 53131.5 \cdot x + 2323.98$	0,999993	5 5,000 a t

Área (µAU.s)

Quantidade (µg/mL)



Pronto

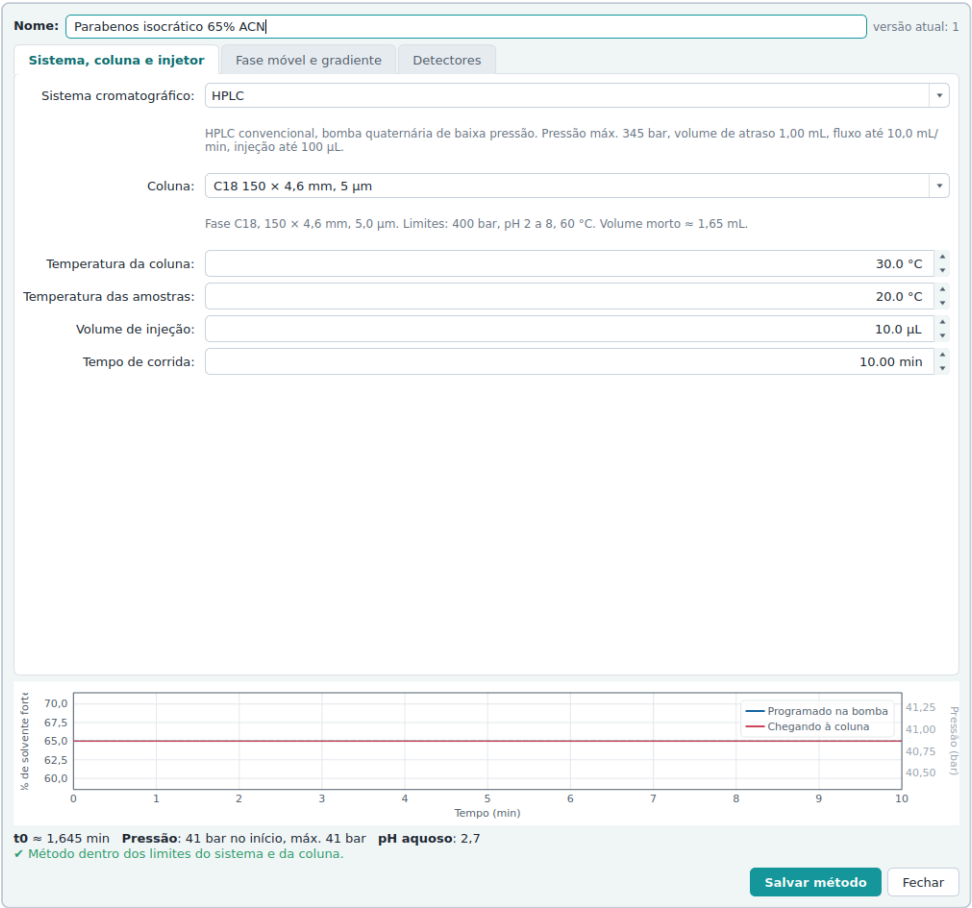
Aba Curvas.

Nada é apagado. Salvar um método com o mesmo nome cria a versão seguinte; reprocessar um canal cria uma nova versão do resultado. As versões antigas continuam consultáveis (*Histórico de versões, Mostrar todas as versões*).

7. Método de instrumento

Diz como o equipamento virtual trabalha: sistema, coluna, **fase móvel**, programa da bomba, injetor e detectores. Cria-se em *Projeto ▶ Métodos ▶ + Novo método ▶ Método de instrumento...*, ou salvando a partir da tela *Desenvolver método*. A janela tem três abas e, embaixo, um gráfico com o programa da bomba, a composição que realmente chega à coluna (atrasada pelo volume de atraso do sistema) e a pressão prevista.

Aba Sistema, coluna e injetor



Sistema, coluna, temperaturas, volume de injeção e tempo de corrida.

Campo	Para que serve
Sistema cromatográfico	HPLC (345 bar), ARC (655 bar) ou UPLC (1034 bar). Define pressão máxima, volume de atraso do gradiente, dispersão fora da coluna e taxa máxima do detector.
Coluna	Qualquer coluna da biblioteca. Digite para buscar. A fase da coluna define o modo de separação (reversa, normal ou HILIC).
Temperatura da coluna	Mais quente: menos retenção, menos pressão, picos um pouco mais estreitos.
Temperatura das amostras	Só informativa.
Volume de injeção	Volume padrão do método; a linha do sample set pode usar outro.
Tempo de corrida	Duração da aquisição. Em gradiente, inclua o reequilíbrio.

Aba Fase móvel e gradiente

Nome: versão atual: 1

Sistema, coluna e injetor **Fase móvel e gradiente** Detectores

Linhas de solvente

Linha	Solvente	Aditivo / tampão (só no aquoso)	pH
A	Água / tampão aquoso	Ácido fórmico 0,1%	2.7
B	Acetonitrila	Água pura	7.0
C	Metanol	Água pura	7.0
D	Água / tampão aquoso	Água pura	7.0

Tabela de gradiente

Tempo (min)	Fluxo (mL/min)	%A	%B	%C	%D	Curva
0	1	35	65	0	0	6

+ Linha Remover linha Gradiente linear...

Curva: 6 = linear, 1 = degrau no início, 11 = degrau no fim, 2-5 convexas, 7-10 côncavas.

% de solvente forte

Tempo (min)

Pressão (bar)

t0 ≈ 1,645 min Pressão: 41 bar no início, máx. 41 bar pH aquoso: 2,7
✓ Método dentro dos limites do sistema e da coluna.

Salvar método Fechar

As quatro linhas de solvente e a tabela de gradiente.

É aqui que a fase móvel é cadastrada. O equipamento tem quatro linhas (canais A, B, C e D). Em cada uma escolha o solvente; nas que não forem usadas, escolha **Não usar**. Quando o solvente é *Água / tampão aquoso*, escolha também o aditivo ou tampão e, se quiser, corrija o pH.

A **tabela de gradiente** é o programa da bomba. Cada linha é um ponto: no tempo indicado a composição chega aos valores da linha.

- **Uma linha só** = corrida isocrática (a composição é a mesma do início ao fim).
- **Duas ou mais linhas** = gradiente. A coluna *Curva* diz como se vai de um ponto ao outro: 6 é linear; 1 é degrau imediato; 11 é degrau no fim; 2 a 5 são convexas e 7 a 10, côncavas.
- A soma de %A + %B + %C + %D precisa dar 100 em todas as linhas. Um canal marcado como *Não usar* tem de ficar em 0.
- **Gradiente linear...** monta sozinho um gradiente entre dois canais, com patamar final e volta às condições iniciais.

Miscibilidade. Água e solventes apolares (hexano, heptano, isoctano, ciclo-hexano, tolueno, diclorometano, clorofórmio, MTBE, acetato de etila) não se misturam, assim como acetonitrila e alcanos. O programa recusa o método e diz por quê.

Aba Detectores

Nome:

versão atual: 1

Sistema, coluna e injetor

Fase móvel e gradiente

Detectores

☐ UV/Vis (TUV)

λ:

Taxa:

Filtro (const. de tempo):

☒ PDA (arranjo de fotodiodos)

Faixa de: até:

Resolução:

Canal 2D em:

Banda:

Taxa:

Filtro (const. de tempo):

☐ Fluorescência

Excitação:

Emissão:

Ganho:

Taxa:

Filtro (const. de tempo):

☐ Índice de refração

Temperatura da cela:

Polaridade:

Taxa:

Filtro (const. de tempo):

☐ ELSD (espalhamento de luz)

Tubo de deriva:

Gás:

Ganho:

Taxa:

Filtro (const. de tempo):

70.0

67.5

65.0

62.5

60.0

0

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

— Programado na bomba

— Chegando à coluna

41.25

41.00

40.75

40.50

Pressão (bar)

t₀ ≈ 1,645 min

Pressão: 41 bar no início, máx. 41 bar

pH aquoso: 2,7

✓ Método dentro dos limites do sistema e da coluna.

Salvar método

Fechar

Marque o quadro de cada detector que estará ligado.

Detector	Quando usar	Campos
UV/Vis	Compostos com cromóforo. O mais comum.	λ, taxa, filtro
PDA	Como o UV, gravando o espectro inteiro: permite pureza de pico e escolher o λ depois.	faixa, resolução, canal 2D, banda, taxa, filtro
Fluorescência	Muito sensível e seletivo; só para quem fluoresce (HPAs, aflatoxinas, quinolonas...).	excitação, emissão, ganho
Índice de refração	Universal (açúcares, polióis). Só isocrático.	temperatura da cela, polaridade
ELSD	Universal para não voláteis (lipídios, açúcares); aceita gradiente. Resposta não linear; exige fase móvel volátil.	tubo de deriva, gás, ganho

Taxa: procure ter de 20 a 40 pontos por pico. **Filtro:** reduz o ruído, mas alarga picos estreitos.

8. Soluções: o conteúdo do frasco

Como o instrumento é virtual, é preciso dizer o que há dentro de cada frasco. Isso é a **solução**: uma lista de compostos da biblioteca com as concentrações. Cadastre em *Projeto* ► *Soluções* ► **+ Nova solução**, ou pelo botão **Nova solução...** da própria tela *Executar amostras*.

Nome:

Tipo:

Diluyente:

Exemplos:

Composto	Concentração (µg/mL)
Butilparabeno	20
Etilparabeno	20
Metilparabeno	20
Propilparabeno	20

+ Composto

Remover

1.000 ×

Multiplicar concentrações

Um diluyente mais forte que a fase móvel inicial alarga e deforma os primeiros picos; um diluyente mais fraco concentra a banda na cabeça da coluna.

Salvar solução

Fechar

Cadastro de uma solução.

Campo	Para que serve
Nome	É o nome que aparece na coluna <i>Solução (conteúdo do frasco)</i> do sample set.
Tipo	Padrão, Amostra, Branco ou Controle. Preenche a função da linha quando se usa <i>Uma linha por solução</i> .
Diluyente	Força do solvente em que a amostra está dissolvida: 0% = solvente fraco puro, 100% = solvente forte puro. Diluyente mais forte que a fase móvel inicial deforma os primeiros picos.
Exemplos	Carrega uma mistura pronta (analgésicos, vitaminas, corantes, aflatoxinas...).
Tabela	Compostos e concentrações em µg/mL. <i>Multiplicar concentrações</i> ajuda a criar os níveis de uma curva.

Fase móvel × conteúdo do frasco

São duas coisas diferentes e ficam em lugares diferentes:

- A **fase móvel** é o que a bomba empurra pela coluna. Fica no **método de instrumento** (capítulo 7), nos canais A a D.
- O **conteúdo do frasco** é o que o injetor aspira. É a **solução** escolhida em cada linha do sample set.

Como pôr “fase móvel” na linha 1 (injeção de branco)

É comum a primeira injeção da fila ser um branco de fase móvel ou de diluente. Há duas maneiras:

1. **Sem cadastrar nada:** na coluna *Solução (conteúdo do frasco)* da linha 1 escolha **(Branco: só fase móvel)**, que é o primeiro item da lista, e na coluna *Função* escolha **Branco**. O frasco não tem nenhum composto, e o cromatograma mostra só a linha de base daquela fase móvel (ruído, deriva e a subida do gradiente, se houver).
2. **Cadastrando um branco próprio:** crie uma solução chamada, por exemplo, “Branco (diluente)”, tipo *Branco*, **sem nenhum composto**, e escolha-a na linha.

O branco serve também para ver o **arraste**: se a injeção anterior era concentrada, uma fração pequena dela aparece no branco seguinte.

9. Executar amostras

Esta tela é um **instrumento virtual**. Ela não se comunica com cromatógrafos reais. Cada injeção é calculada pelo modelo a partir do método de instrumento e da solução, com ruído, deriva e pequenas variações de injeção e de fluxo, como numa corrida de verdade.

Injeção única

CROMA SCIENCE

Projeto aberto: **Exemplo — Parabenos**
Teste: 30 dia(s) restante(s)
Breno Carvalho
Administrador · breno

Manual (F1)
Sair da sessão

Injeção única | Sample set (fila de amostras) | Aquisição real (caixa A/D)

Nome da amostra: **Amostra 1**

Conteúdo do frasco (solução): **(Branco: só fase móvel)** Nova solução...

Função: **Amostra**

Method set ou método de instrumento: **Set: Parabenos**

Frasco: **1**

Injetar | Monitorar linha de base por **3.0 min**

Instrumento

Estado Pronto aguardando injeção	Tempo de corrida —	Fluxo 1,000 mL/min	Composição A 35,0% B 65,0% condição inicial	Pressão 41 bar limite 345 bar	Coluna 30,0 °C C18 150 x 4,6 mm, 5 µm
--	------------------------------	-------------------------------------	---	---	---

Mostrar: Velocidade: **60x** (1 min de corrida por segundo) Abortar

Sinal

Tempo (min)

Sem dados

Mensagens do instrumento

Pronto

Aba Injeção única.

Preencha o nome da amostra, o **conteúdo do frasco**, a função e o método, e clique em **Injetar**. **Monitorar linha de base** roda as condições iniciais sem injetar e sem gravar, para ver a linha de base.

Sample set (fila de amostras)

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Injeção única

Sample set (fila de amostras)

Aquisição real (caixa A/D)

Sample set: Doseamento lote 01

Frasco	Nome da amostra	Solução (conteúdo do frasco)	Função	Nível	Nº inj.	Method set / método	Vol. (µL)
1	Branco	(Branco: só fase móvel)	Branco		1	Set: Parabenos	
2	Padrão N1	Padrão nível 1	Padrão	1	1	Set: Parabenos	
3	Padrão N3	Padrão nível 3	Padrão	3	1	Set: Parabenos	
4	Padrão N5	Padrão nível 5	Padrão	5	1	Set: Parabenos	
5	Creme lote 01	Amostra creme lote 01	Amostra		2	Set: Parabenos	

+ Linha

Duplicar

Remover

Uma linha por solução

Limpar

Nova solução...

▶ Executar sample set

Vol. e Corrida em branco = valores do método. Padrões usam a composição da solução como quantidade. A fase móvel é definida no método de instrumento; na coluna Solução vai o conteúdo do frasco.

Instrumento

Estado Pronto

Tempo de corrida —

Fluxo 1,000 mL/min

Composição A 35,0% B 65,0% condição inicial

Pressão 41 bar limite 345 bar

Coluna 30,0 °C C18 150 × 4,6 mm, 5 µm

Mostrar:

Velocidade: 60x (1 min de corrida por segundo)

Abortar

Sinal

Sem dados

Tempo (min)

Mensagens do instrumento

Pronto

Fila com um branco de fase móvel na linha 1, três níveis de padrão e uma amostra em duplicata.

Coluna	O que preencher
Frasco	Posição na bandeja (identificação).
Nome da amostra	Como a injeção será identificada nos resultados.
Solução (conteúdo do frasco)	Uma solução do projeto, ou (Branco: só fase móvel) . A fase móvel não entra aqui.
Função	Padrão: entra na curva; a quantidade vem da composição da solução. Amostra e Controle: são quantificados pela curva. Branco: não é quantificado.
Nível	Rótulo do nível da curva (opcional).
Nº inj.	Injeções repetidas do mesmo frasco.
Method set / método	Method set (resultado pronto no fim) ou só o método de instrumento.
Vol. (µL) e Corrida (min)	Em branco, valem os valores do método.
Peso e Diluição	Resultado final = quantidade lida na curva × diluição ÷ peso.

Botões:

+ Linha

,

Duplicar

,

Remover

,

Uma linha por solução

 (cria a fila a partir das soluções cadastradas),

Limpar

,

Nova solução...

 e

▶ Executar sample set

.

Antes de começar, o programa confere a fila inteira: se algum método estoura a pressão do sistema ou da coluna, mistura solventes imiscíveis ou usa um detector fora da licença, a fila não começa e a mensagem diz a linha e o motivo.

Painel do instrumento

Corrida em andamento: estado, tempo, fluxo, composição, pressão e temperatura.

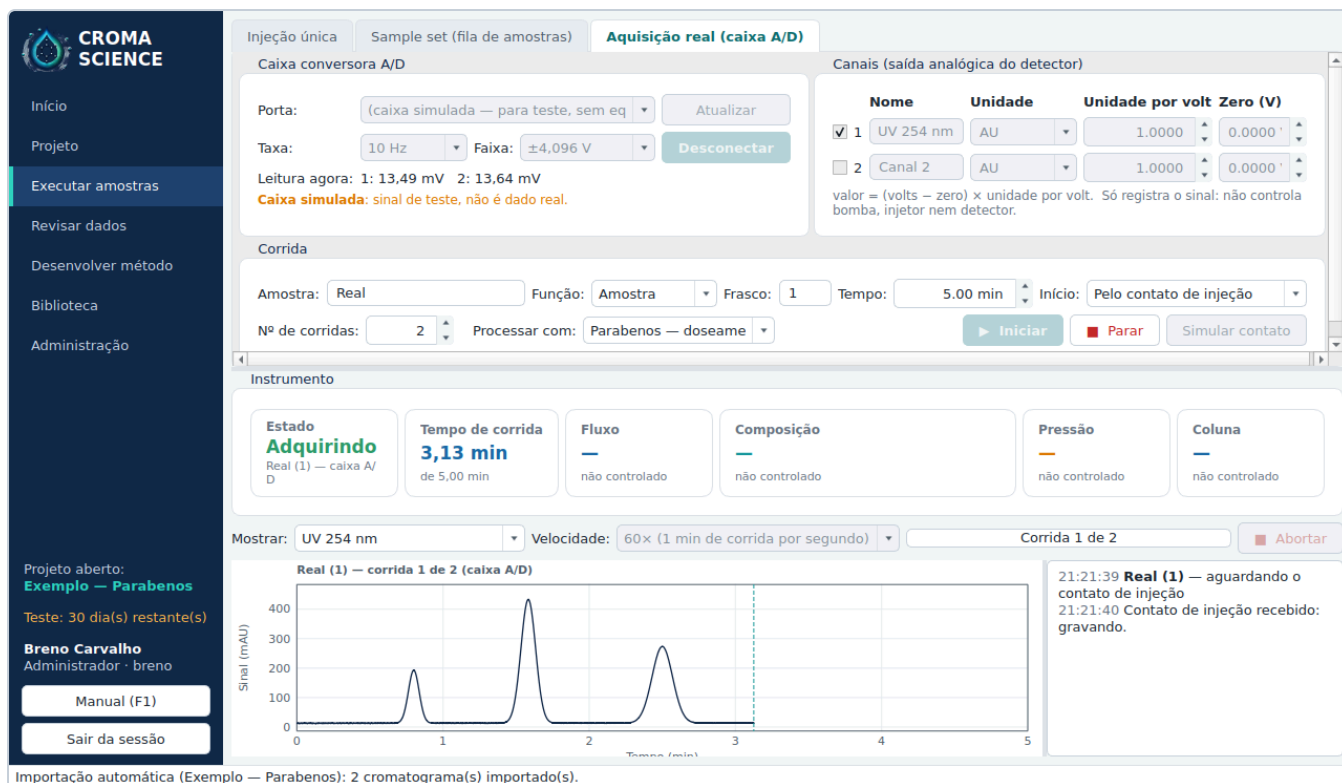
- **Mostrar:** canal que aparece no gráfico. **Velocidade:** tempo real, 10x, 60x, 600x ou instantâneo.
- **Abortar:** interrompe; o trecho adquirido é gravado e marcado como corrida abortada.
- O quadro à direita registra as mensagens do instrumento (início e fim de cada injeção, avisos do método).

Terminada a fila, os dados brutos ficam em *Projeto* ► *Canais* e, se foi usado um method set, os resultados e as curvas já estão em *Resultados* e *Curvas*.

Aquisição real (caixa A/D)

A terceira aba grava o **sinal de verdade** de um detector. Uma caixa conversora ligada à USB lê a saída analógica do detector (uma tensão proporcional ao sinal) e, se quiser, o contato de início de injeção do injetor.

A caixa **só registra o sinal**. Bomba, injetor, forno e detector continuam sendo operados pelo painel do equipamento ou pelo software do fabricante. O projeto da caixa (Arduino + ADS1115), o firmware e os **cuidados elétricos** estão na pasta **hardware** da instalação (menu Iniciar ► Croma Science ► Caixa AD). Leia o arquivo `LEIAME_CaixaAD.md` antes de ligar qualquer coisa no detector: tensão negativa ou acima de 5 V na entrada queima o conversor. O firmware foi compilado, mas não foi testado numa placa ligada a um detector real; faça a conferência descrita naquele arquivo.



Aquisição com a caixa simulada: corrida 1 de 2 em andamento.

Caixa conversora A/D

Campo	Para que serve
Porta	Porta serial (COM) da caixa. <i>Atualizar</i> procura de novo as portas. A opção (caixa simulada) gera um sinal de teste, sem equipamento; os dados dela ficam marcados como <i>Simulado</i> .
Taxa	Leituras por segundo (1 a 50 Hz). Procure ter de 20 a 40 pontos por pico.
Faixa	Faixa de tensão de entrada do conversor. Use a menor que contenha a saída do detector: a leitura fica mais fina. Se o sinal passar da faixa, os picos saem cortados.
Conectar	Abre a porta e pede a identificação da caixa. <i>Leitura agora</i> mostra a tensão lida.

Canais

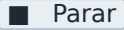
Para cada canal ligado, informe o nome, a unidade e **quantas unidades vale 1 volt** da saída do detector; o valor está no manual ou no ajuste do detector. O programa calcula: $\text{valor} = (\text{volts} - \text{zero}) \times \text{unidade por volt}$.

Saída analógica do detector	Unidade	Unidade por volt
1 AU por volt	AU	1
2 AU por volt	AU	2
1000 mAU por volt	mAU	1000
Gravar a própria tensão	mV	1000

Corrida

Campo	Para que serve
Amostra, Função, Frasco	Identificação da injeção.
Tempo	A gravação para sozinha ao chegar a este tempo.

Início	Ao clicar em Iniciar: o tempo zero é o clique. Pelo contato de injeção: o programa mostra a linha de base e espera o injetor fechar o contato; o tempo zero é esse instante.
Nº de corridas	Com início pelo contato, depois de cada corrida o programa volta a esperar o próximo contato. Serve para acompanhar um amostrador automático.
Processar com	Método de processamento aplicado ao fim de cada corrida (usa as curvas que já existem).

 **Parar** interrompe e grava o trecho adquirido como corrida abortada. Os canais gravados aparecem em *Projeto* ► *Canais* com a origem “Adquirido: caixa A/D” e são revisados e processados como os demais. Durante a aquisição real as abas de simulação ficam bloqueadas, e vice-versa.

10. Método de processamento e method set

O **método de processamento** diz como transformar o cromatograma em resultado. Crie em *Projeto ▶ Métodos* ou, com mais conforto, em *Revisar dados ▶ Método...*, com um padrão aberto: o gráfico da janela mostra a integração enquanto você mexe nos parâmetros.

Nome: versão atual: 1

Integração

Componentes

Calibração

Adequação do sistema

Pureza (PDA)

Largura do pico:

↑ largura na base do pico mais estreito; 0

↓ = automática

Limiar de detecção:

inclinação mínima, em unidade do canal por segundo; 0 = automático

Área mínima:

na unidade da tabela de picos (μAU·s nos canais em AU)

Altura mínima:

na unidade da tabela de picos (μAU nos canais em AU)

Integrar a partir de:

0 = desde o início

Integrar até:

0 = até o fim

Inibir integração em:

☐ Linha de base vale a vale em picos fundidos (em vez de linha comum com queda vertical)

Salvar método

Fechar

Método de processamento: integração.

Integração

Campo	Para que serve
Largura do pico	Largura, na base, do pico mais estreito. Define a suavização para achar início e fim.
Limiar de detecção	Inclinação mínima para considerar que um pico começou. Maior = ignora mais ruído.
Área mínima / Altura mínima	Picos menores são descartados.
Integrar a partir de / até	Limita o trecho integrado (por exemplo, para pular o volume morto).
Inibir integração em	Trechos sem integração: 0-1,2; 8-9 .
Linha de base vale a vale	Em picos fundidos: marcada, a linha de base passa pelos vales; desmarcada, usa linha única com queda perpendicular.

Componentes

Nome: versão atual: 1

Integração **Componentes** Calibração Adequação do sistema Pureza (PDA)

Componente	R esperado (min)	janela ± (min)	Escolher o pico	Padrão interno
Metilparabeno	2,448	0,122	Mais próximo ▼	☐
Etilparabeno	3,267	0,163	Mais próximo ▼	☐
Propilparabeno	4,92	0,246	Mais próximo ▼	☐
Butilparabeno	8,259	0,413	Mais próximo ▼	☐

+ Componente Remover Preencher pelo canal de referência

O nome do componente precisa ser igual ao usado nas quantidades dos padrões. Marque um componente como padrão interno para calibrar pela razão de áreas.

Salvar método Fechar

Tabela de componentes.

Cada linha é um composto esperado, com o tempo de retenção e a janela de busca. O pico que cair na janela recebe o nome. **Preencher pelo canal de referência** preenche a tabela com os picos do cromatograma de referência; depois é só dar os nomes.

Calibração

Resposta (área ou altura), tipo de ajuste (linear, linear pela origem, quadrático, ponto a ponto), ponderação (nenhuma, $1/x$, $1/x^2$) e unidade. Os pontos da curva vêm das injeções com função **Padrão**.

Adequação do sistema e pureza

Com *Calcular a adequação do sistema* marcado, o programa calcula pratos teóricos (USP), fator de cauda, resolução, fator de retenção k e %RSD de área e de tempo nas injeções repetidas, e compara com os limites informados. Com dados de PDA, *Calcular a pureza espectral* compara os espectros ao longo de cada pico.

Method set

Nome:

Método de instrumento: ▼

Método de processamento: ▼

O method set junta o método de aquisição e o de processamento. Com processamento definido, o sample set é integrado e quantificado sozinho ao terminar.

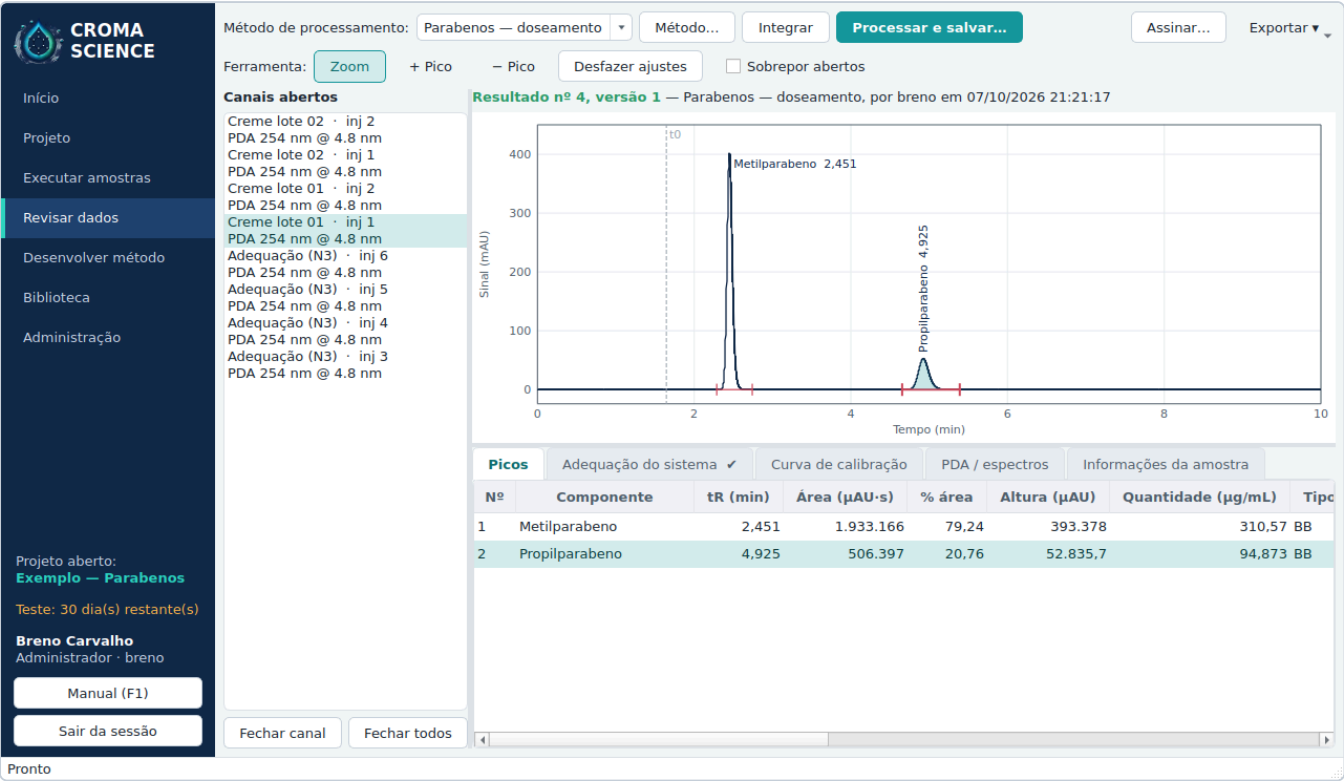
Salvar

Um method set junta um método de instrumento a um de processamento.

Usando o method set nas linhas da fila, o processamento é feito automaticamente no fim da aquisição.

11. Revisar dados

É onde se olha cada cromatograma, simulado ou importado. Abra canais a partir de *Projeto* ► *Canais* ► *Revisar*.



Revisão: canais abertos à esquerda, cromatograma integrado e tabela de picos.

Barra de ferramentas

Controle	O que faz
Método de processamento	Método aplicado ao canal da tela.
Método...	Cria ou edita o método de processamento usando o canal aberto como referência.
Integrar	Aplica o método sem gravar, para experimentar.
Processar e salvar...	Integra, calibra com os padrões, quantifica e grava os resultados.
Zoom / + Pico / – Pico	Modo do mouse no gráfico: ampliar; arrastar do início ao fim para integrar um pico à mão; clicar num pico para retirá-lo.
Desfazer ajustes	Descarta os picos manuais e as remoções deste canal.
Sobrepôr abertos	Desenha todos os canais abertos no mesmo gráfico.
Exportar ▼	Relatório (PDF), imagem (PNG), dados brutos em ARW ou AIA.
Assinar...	Assinatura eletrônica do resultado (edição Completa).

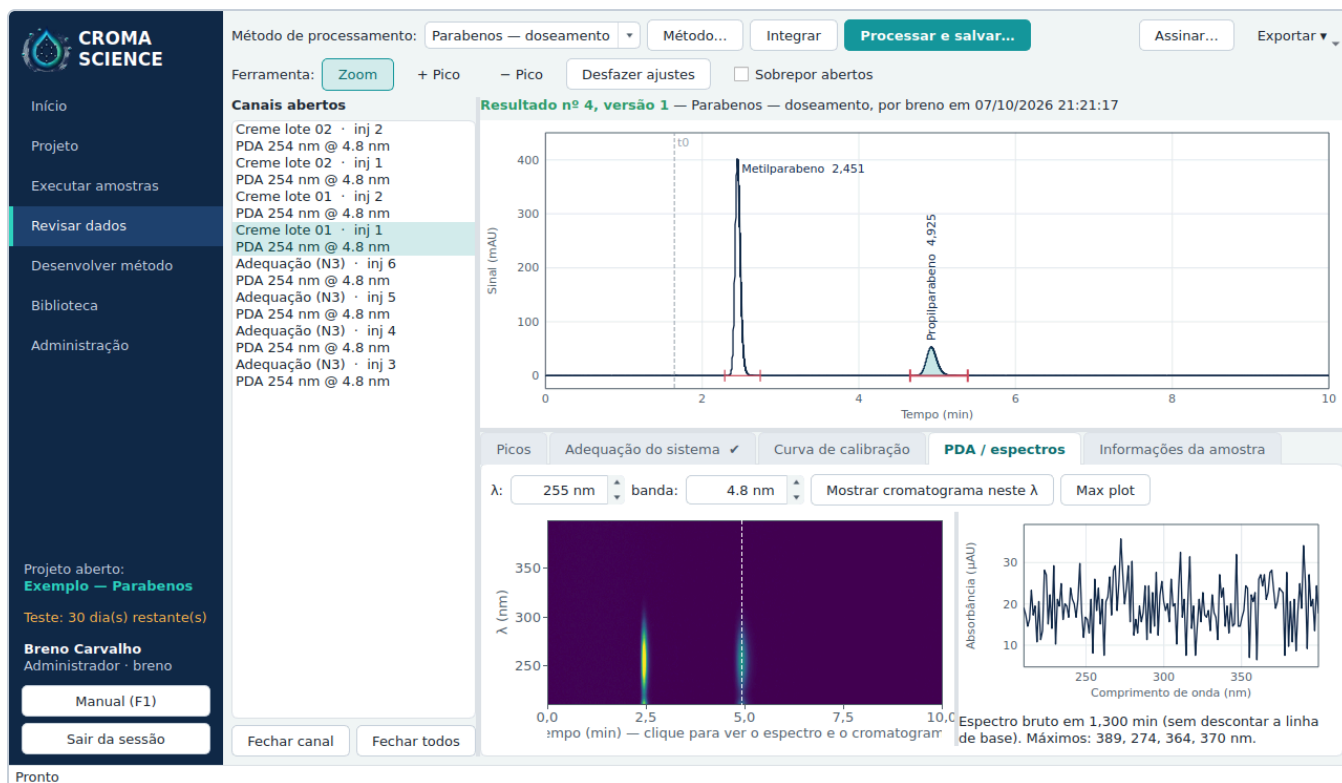
Integração manual fica marcada no resultado e é registrada na trilha de auditoria, com o motivo.

Abas de resultado

- **Picos:** nome, tempo de retenção, área, altura, % de área, quantidade e os parâmetros de adequação de cada pico.
- **Adequação do sistema:** valores por pico e se passam nos limites do método.
- **Curva de calibração:** pontos, equação, R^2 e o ponto da amostra sobre a curva.
- **PDA / espectros:** mapa de absorbância (tempo $\times$ comprimento de onda). Clique no mapa para ver o espectro naquele instante; **Mostrar cromatograma neste λ** extrai um canal 2D; **Max plot** mostra a maior absorbância a cada instante.
- **Informações da amostra:** dados da injeção, do método e a origem do canal.



Curva de calibração.



Dados 3D do PDA e espectro extraído.

12. Desenvolver método

É a bancada de desenvolvimento. À esquerda fica o **editor resumido** do método; à direita, o cromatograma previsto, atualizado a cada alteração, e quatro indicadores: resolução crítica, último pico, pressão máxima e t₀ com a faixa de k.



Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Amostra

Solução: Exemplo: Analgésicos

Montar amostra...

Volume de injeção: 10.0 µL

Sistema e coluna

Sistema: HPLC

Fabricante: Todos os fabricantes

Coluna: C18 150 × 4,6 mm, 5 µm

Temperatura: 30.0 °C

Modo de separação: fase reversa

Fase móvel — canais A, B, C e D

(predefinições de fase móvel...)

Salvar...

	Solvente	Aditivo / tampão	pH
A	Água / tampão	Ácido fórmico	2.7
B	Acetonitrila	Água pura	7.0
C	Não usar	Água pura	7.0
D	Não usar	Água pura	7.0

Eluição

Modo: Gradiente linear

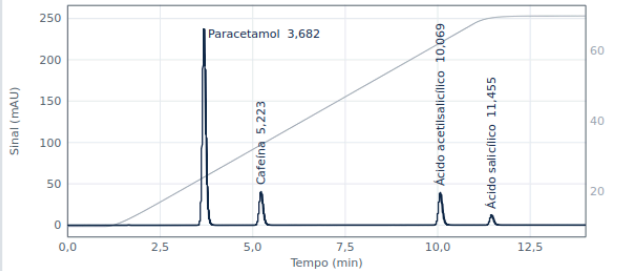
Resolução crítica
7,17
≥ 2,0 é confortável;
≥ 1,5 é linha de base

Último pico
11,46 min
4 de 4 compostos
eluem na corrida

Pressão máxima
54 bar
limite 345 bar

t₀ e faixa de k
1,645 min
k de 1,2 a 6,0 (ideal:
1 a 10)

UV 254 nm



Picos previstos

Composto	tR (min)	k na eluição	Pratos (aparente)	W½ (s)	Cal
Paracetamol	3,682	0,98	7,159	6,1	
Cafeína	5,223	1,13	11,788	6,8	
Ácido acetilsalicílico	10,069	1,28	40,997	7,0	
Ácido salicílico	11,455	1,32	58,735	6,7	

Desenvolver método: fase reversa em gradiente. A linha cinza é a porcentagem de solvente forte que chega à coluna.

Amostra

Em **Solução** escolha uma solução do projeto, uma das 29 misturas de exemplo ou a amostra montada na hora. **Montar amostra...** abre a biblioteca com os 540 compostos: filtre por classe ou digite um pedaço do nome, selecione um ou vários, informe a concentração e clique em **Acrescentar à amostra →**.

Biblioteca — 540 compostos

Antibióticos

Buscar pelo nome

Amicacina

Amoxicilina

Ampicilina

Azitromicina

Benzilpenicilina

Cefadroxila

Cefalexina

Cefazolina

Cefotaxima

Ceftazidima

Ceftriaxona

Cefuroxima

Ciprofloxacino

Clarithromicina

Clindamicina

Cloranfenicol

Doxiciclina

Eritromicina

Etambutol

Isoniazida

Levofloxacino

Linezolida

Metronidazol

Moxifloxacino

Nitrofurantoina

Norfloxacino

Concentração: 20.000 µg

Acrescentar à amostra →

Amostra

Composto	Concentração (µg/mL)
Caféina	50
Paracetamol	50
Ibuprofeno	100

Diluinte: 50 % de solvente forte

Remover

Limpar

A concentração pode ser editada na tabela. O diluinte é a porcentagem de solvente forte em que a amostra está dissolvida (acetonitrila em fase reversa, isopropanol em fase normal).

Usar esta amostra

Cancelar

Montagem da amostra a partir da biblioteca.

Sistema e coluna

Escolha o sistema (HPLC, ARC ou UPLC). Ao trocar, o programa sugere coluna, fluxo e volume de injeção típicos daquele sistema. Em **Fabricante** filtre a lista de colunas (15 fabricantes, além das colunas genéricas); em **Coluna** digite para buscar: “bifenil”, “2,1”, “sílica”, “HILIC”. Logo abaixo, o programa mostra o **modo de separação** resultante.

Fase móvel — canais A, B, C e D

Para guardar a fase móvel que está na tela (solventes, aditivos, pH e porcentagens), clique em **Salvar...** ao lado da lista de predefinições e dê um nome: ela passa a aparecer na lista como *Minha: nome*. Se o solvente ou o tampão que você usa não está na lista, cadastre-o na Biblioteca (capítulo 13).

Os quatro canais aparecem sempre. Em cada um, escolha o solvente ou **Não usar**. As **predefinições de fase móvel** preenchem os quatro canais com combinações usuais e, se a coluna atual não servir para aquele modo, trocam por uma adequada:

Predefinição	A	B	C	D
Fase reversa — água ácida / acetonitrila	Água + ác. fórmico 0,1%	Acetonitrila	—	—
Fase reversa — água ácida / metanol	Água + ác. fórmico 0,1%	Metanol	—	—
Fase reversa — tampão fosfato / ACN / MeOH	Fosfato pH 3,0	Acetonitrila	Metanol	—
Fase reversa — quaternário	Fosfato pH 3,0	Acetonitrila	Metanol	Água
HILIC — acetonitrila / formiato de amônio	Formiato de amônio pH 3,8	Acetonitrila	—	—
Fase normal — hexano / isopropanol	n-Hexano	Isopropanol	—	—
Fase normal — hexano / acetato de etila	n-Hexano	Acetato de etila	—	—
Fase normal — heptano / etanol	n-Heptano	Etanol	—	—
Fase normal — hexano / diclorometano / metanol	n-Hexano	Diclorometano	Metanol	—

Os três modos de separação

Modo	Coluna	Fase móvel	Quem retém mais	Solvente forte
Fase reversa	C18, C8, C4, C30, fenil, bifenil, PFP, ciano (RP)	Água ou tampão + acetonitrila, metanol, etanol, isopropanol, THF	Os mais apolares	O orgânico
Fase normal	Sílica, diol, ciano (NP), amino	Hexano ou heptano + álcool, acetato de etila, diclorometano, MTBE (sem água)	Os mais polares	O mais polar (álcool)
HILIC	Sílica HILIC, amida, zwitteriônica, amino	Acetonitrila (60 a 95%) + água ou tampão	Os muito polares (açúcares, aminoácidos)	A água

Colunas de sílica, diol e amino trabalham em fase normal quando a fase móvel não tem água e em HILIC quando tem. O programa decide pelo que está nos canais.

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto: Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Pronto

Amostra

Solução: Exemplo: Vitaminas lipossolúveis

Montar amostra...

Volume de injeção: 10.0 µL

Sistema e coluna

Sistema: HPLC

Fabricante: Todos os fabricantes

Coluna: a 250 × 4,6 mm, 5 µm (fase normal)

Temperatura: 30.0 °C

Modo de separação: fase normal

Fase móvel — canais A, B, C e D

(predefinições de fase móvel...)

Salvar...

	Solvente	Aditivo / tampão	pH
A	n-Hexano	Água pura	7.0
B	Isopropanol (2-	Água pura	7.0
C	Não usar	Água pura	7.0
D	Não usar	Água pura	7.0

Eluição

Modo: Isocrático

Resolução crítica 1,43

Último pico 6,01 min

Pressão máxima 34 bar

t0 e faixa de k 2,742 min

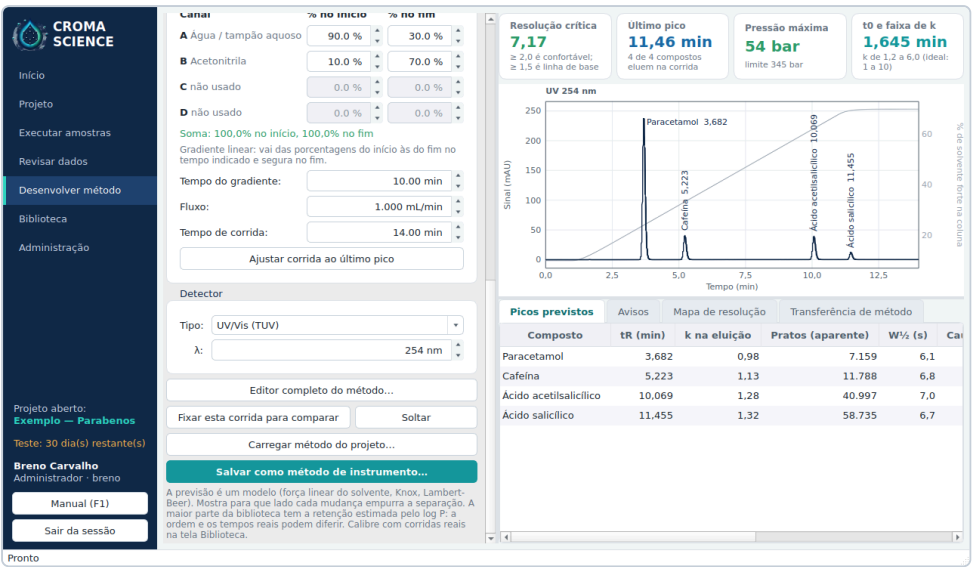
UV 292 nm

Picos previstos

Composto	tR (min)	k na eluição	Pratos (aparente)	W½ (s)
Alfa-tocoferol (vitamina E)	4,106	0,50	11.855	5
Filoquinona (vitamina K1)	4,325	0,58	12.055	5
Colecalciferol (vitamina D3)	5,084	0,85	12.565	6
Retinol (vitamina A)	6,014	1,19	13.393	7

Fase normal: vitaminas lipossolúveis em sílica com hexano / isopropanol.

Eluição



Eluição, detector e botões (parte de baixo do editor resumido).

Os quatro canais aparecem nos dois modos; os marcados como *Não usar* ficam desabilitados em 0%.

- **Isocrático:** uma coluna de porcentagens. *As proporções são as mesmas do início ao fim da corrida.*
- **Gradiente linear:** duas colunas, % no início e % no fim, e o tempo do gradiente. A composição vai de uma à outra nesse tempo e fica no fim.
- **Tabela do método:** usa a tabela de várias etapas do editor completo; aqui só mudam solventes, fluxo e tempo de corrida.

Ao mexer numa porcentagem, o programa ajusta os outros canais em uso para a **soma dar 100%** (começando pelo primeiro). A linha *Soma* fica verde quando está certo. **Ajustar corrida ao último pico** põe o tempo de corrida 15% depois do último pico previsto.

Detector

Tipo de detector e comprimento de onda (ou excitação e emissão). Compostos sem cromóforo não aparecem no UV: use índice de refração (isocrático) ou ELSD.

Lendo o resultado

Indicador	Como ler
Resolução crítica	Menor resolução entre vizinhos. $\geq 2,0$ é confortável; $\geq 1,5$ é separação até a linha de base; abaixo disso os picos se sobrepõem.
Último pico	Tempo do último composto e quantos eluem dentro da corrida.
Pressão máxima	Comparada com o limite do sistema e da coluna. Vermelho = não pode rodar.
t0 e faixa de k	Tempo morto e fator de retenção. O ideal é k entre 1 e 10 (isocrático).

A aba **Picos previstos** lista cada composto com tR, k, pratos, largura, cauda e resolução; em vermelho os que não eluem ou estão mal resolvidos. A aba **Avisos** explica cada problema (pH fora da faixa da coluna, comprimento de onda abaixo do corte do solvente, tampão não volátil com ELSD, gradiente com RI, diluente forte demais...).

Mapa de resolução



**CROMA
SCIENCE**

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:
Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho
Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Pronto

Amostra

Solução:

Montar amostra...

Volume de injeção:

Sistema e coluna

Sistema:

Fabricante:

Coluna:

Temperatura:

Modo de separação: **fase reversa**

Fase móvel — canais A, B, C e D

(predefinições de fase móvel...)

	Solvente	Aditivo / tampão	pH
A	Água / tampão	Ácido fórmico	2.7
B	Acetonitrila	Água pura	7.0
C	Não usar	Água pura	7.0
D	Não usar	Água pura	7.0

Eluição

Modo:

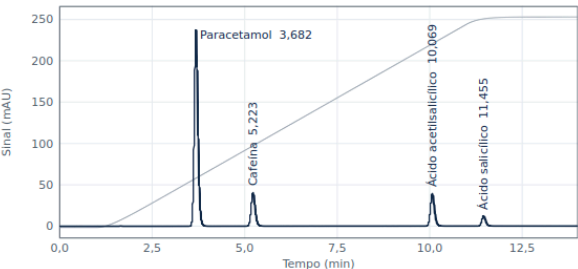
Resolução crítica
7,17
≥ 2,0 é confortável;
≥ 1,5 é linha de base

Último pico
11,46 min
4 de 4 compostos
eluem na corrida

Pressão máxima
54 bar
limite 345 bar

t0 e faixa de k
1,645 min
k de 1,2 a 6,0 (ideal:
1 a 10)

UV 254 nm



Sinal (mAU)

Tempo (min)

Picos previstos

Avisos

Mapa de resolução

Transferência de método

Variar: de até

Melhor: **3,75** → Rs 4,76, último pico em 7,02 min



Resolução crítica

Tempo do gradiente

Último pico (min)

Mapa de resolução: como a resolução crítica e o tempo respondem a um parâmetro.

(Edição Completa.) Escolha o que variar (% de um canal, tempo do gradiente, temperatura, pH, fluxo) e a faixa, e clique em **Calcular**. **Usar o melhor valor** põe no método o valor que dá $R_s \geq 2$ no menor tempo.

Transferência de método


**CROMA
SCIENCE**

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restantes(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Amostra

Solução: Exemplo: Analgésicos

Montar amostra...

Volume de injeção: 10.0 µL

Sistema e coluna

Sistema: HPLC

Fabricante: Todos os fabricantes

Coluna: C18 150 × 4,6 mm, 5 µm

Temperatura: 30.0 °C

Modo de separação: fase reversa

Fase móvel — canais A, B, C e D

(predefinições de fase móvel...)

Salvar...

	Solvente	Aditivo / tampão	pH
A	Água / tampão	Ácido fórmico	2.7
B	Acetonitrila	Água pura	7.0
C	Não usar	Água pura	7.0
D	Não usar	Água pura	7.0

Eluição

Modo: Gradiente linear

Resolução crítica

7,17

≥ 2,0 é confortável;
≥ 1,5 é linha de base

Último pico

11,46 min

4 de 4 compostos
eluem na corrida

Pressão máxima

54 bar

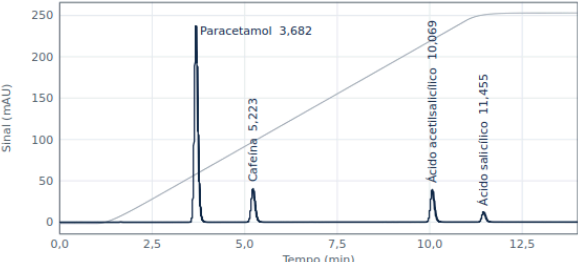
limite 345 bar

t0 e faixa de k

1,645 min

k de 1,2 a 6,0 (ideal:
1 a 10)

UV 254 nm



Picos previstos

Avisos

Mapa de resolução

Transferência de método

Para o sistema: UPLC

Aplicar ao método

e a coluna:

C18 50 × 2,1 mm, 1,7 µm

Parâmetro	Método atual	Método transferir
Sistema	HPLC	UPLC
Coluna	C18 150 × 4,6 mm, 5 µm	C18 50 × 2,1 mm...
Fase estacionária	C18	C18
L/dp (poder de separação)	30.000	29.412
Fluxo (mL/min)	1.000	0.613

Escala geométrica: $\text{fluxo} \propto d^2 \cdot (\text{dp antigo} / \text{dp novo})$, volume de injeção $\propto$ volume da coluna, tempos do gradiente mantendo o número de volumes de coluna. A seletividade só se mantém se a fase estacionária for a mesma.

Pronto

Transferência de HPLC para UPLC.

(Edição Completa.) Calcula fluxo, volume de injeção e tempos de gradiente equivalentes para outro sistema e outra coluna (escala geométrica, mantendo o número de volumes de coluna). **Aplicar ao método** troca o método da tela pelo transferido. A seletividade só se mantém se a fase estacionária for a mesma.

Botões finais

- **Editor completo do método...**: abre a janela do capítulo 7 com o método da tela.
- **Fixar esta corrida para comparar**: guarda o cromatograma atual, em outra cor, para comparar com o próximo.
- **Carregar método do projeto...** e **Salvar como método de instrumento...**.

13. Biblioteca de compostos e colunas

Compostos

**CROMA SCIENCE**

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:

Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho

Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Compostos

Colunas

Solventes

Aditivos e tampões

Fases móveis salvas

Sistemas

Buscar composto ou classe

Classe: Todas as classes

Retenção: Todos

540 de 540 compostos

Composto	Classe	Massa molar	log P	log kw	S	Caráter	pKa	UV: λmáx (nm)	Fluore
Cetoprofeno	AINES	254,3		3,00	3,90	Ácido	4,45	255, 205	
Diclofenaco	AINES	296,1		4,10	4,60	Ácido	4,15	276, 205	
Ibuprofeno	AINES	206,3		3,90	4,30	Ácido	4,90	221, 264	
Naproxeno	AINES	230,3		3,20	4,00	Ácido	4,15	231, 272, 330	230 / 35
Acetofenona	Alquilfenonas	120,2		1,60	3,00	Neutro		245, 280, 200	
Butirofenona	Alquilfenonas	148,2		2,50	3,60	Neutro		245, 280, 200	
Hexanofenona	Alquilfenonas	176,3		3,40	4,20	Neutro		245, 280, 200	
Propiofenona	Alquilfenonas	134,2		2,05	3,30	Neutro		245, 280, 200	
Valerofenona	Alquilfenonas	162,2		2,95	3,90	Neutro		245, 280, 200	
Cadaverina	Aminoácidos e aminas	102,2	-0,60	-0,31	2,52	Base	10,90	195	
Fenilalanina	Aminoácidos e aminas	165,2	-1,38	-0,97	2,96	Ácido	1,83	206, 257	
Histamina	Aminoácidos e aminas	111,2	-0,70	-0,39	2,59	Base	6,00	211	
Histidina	Aminoácidos e aminas	155,2	-3,32	-2,20	2,89	Base	6,04	211	
Putrescina	Aminoácidos e aminas	88,2	-0,70	-0,39	2,40	Base	10,80	195	
Tiramina	Aminoácidos e aminas	137,2	0,86	0,93	3,19	Base	9,74	222, 275	275 / 30
Tirosina	Aminoácidos e aminas	181,2	-2,26	-1,72	3,05	Ácido	2,20	222, 275	274 / 30
Triptofano	Aminoácidos e aminas	204,2	-1,06	-0,70	3,19	Ácido	2,38	218, 279	280 / 35
Paracetamol	Analgésicos	151,2		0,42	3,00	Ácido	9,50	244, 200	
Ácido acetilsalicílico	Analgésicos	180,2		1,95	3,40	Ácido	3,50	227, 276	

+ Novo composto

Abrir / editar

Duplicar

Excluir

Parâmetros aproximados, para ensino e planejamento. "Ajustado" = retenção acertada à mão para um comportamento típico; "Estimado" = retenção calculada só pelo log P (a ordem de eluição real pode ser outra). Calibre com corridas reais antes de confiar nos tempos.

Pronto

Biblioteca de compostos, com busca, filtro por classe e origem da retenção.

São 583 compostos em 49 classes: analgésicos e anti-inflamatórios, antibióticos, cardiovasculares, antidiabéticos, antidepressivos, antipsicóticos, anticonvulsivantes, benzodiazepínicos, hormônios e corticoides, antifúngicos e antivirais, oncológicos, vitaminas, açúcares e polióis, edulcorantes, conservantes, corantes, ácidos orgânicos, fenólicos e flavonoides, carotenoides, micotoxinas, defensivos agrícolas, canabinoides, entre outros.

Defensivos agrícolas. 48 ativos e metabólitos usados no Brasil: herbicidas (glifosato, glufosinato, 2,4-D, diuron, ametrina, triazinas, picloram, paraquate...), inseticidas (clorpirifós, fipronil, neonicotinoides, carbamatos, piretroides...), fungicidas (triazóis, estrobilurinas, carbendazim, clorotalonil...) e os metabólitos AMPA e ETU. A observação de cada ficha diz o tipo e a dica de análise. Compostos *sem cromóforo* (glifosato, AMPA, glufosinato, acefato) quase não aparecem no UV: na prática exigem derivatização ou LC-MS. Os dications paraquate e diquate não retêm em C18 comum (par iônico ou troca catiônica). O mancozebe é um complexo polimérico e não é separado como tal; a biblioteca traz o seu metabólito ETU. Massa molar conferida no PubChem; log P, pKa e UV da literatura, aproximados.

Leia a coluna “Retenção”.

- **Ajustado** (48 compostos): os parâmetros de retenção foram acertados para um comportamento típico em C18.
- **Estimado** (535 compostos): a retenção foi calculada **só a partir do log P**. Dá a ordem de grandeza, mas a ordem de eluição entre compostos parecidos e os tempos reais podem ser diferentes.

Para a maior parte dos compostos, só a massa molar e o log P foram conferidos em base pública (PubChem). Absortividades, vários pKa e os comprimentos de onda de fluorescência são valores aproximados de literatura. Antes de confiar nos tempos, **calibre** com corridas reais.

Cadastro do composto

Nome:

Classe:

Massa molar:

Retenção estimada pelo log P (4,30): a ordem de eluição e os tempos reais podem ser diferentes. Calibre com duas corridas reais. Absortividade (ϵ) aproximada. $\log P = X\log P_3$ ($\log D$ 7,4 $\approx$ 1,2). Tetrazol ácido: pKa relatado 4,9-5,5. Fonte: PubChem; literatura

Retenção em fase reversa (referência: C18, acetonitrila, 30 °C)

log kw (retenção em 100% água):

Calibrar com duas corridas reais...

S (inclinação por fração de orgânico):

Caráter: pKa:

Desvio em metanol (log k):

Caráter aromático (π - π):

Tendência a cauda:

Deteção

Bandas de UV:

cada banda: comprimento de onda do máximo (nm) : absortividade molar ϵ (L/mol-cm) : largura (nm)

☒ Fluoresce excitação: emissão: rendimento:

dn/dc (índice de refração):

Volatilidade (0 a 1):

☐ Retém em HILIC/amino log k em 75% ACN: inclinação:



Salvar composto

Fechar

Cadastro de um composto, com o espectro de UV resultante.

Campo	Significado
log kw	Retenção extrapolada para 100% de água, em C18. Maior = retém mais em fase reversa.
S	Quanto a retenção cai com o orgânico: $\log k = \log kw - S \cdot \phi$.
Caráter e pKa	Neutro, ácido ou base. Ionizado, o composto retém menos em fase reversa.
Desvio em metanol	Diferença de seletividade ao trocar acetonitrila por metanol.
Caráter aromático	Retenção extra em fases fenil, bifenil e PFP.

Tendência a cauda	Bases em sílica com silanóis livres.
Bandas de UV	$\lambda_{\text{máx}}$: ϵ : largura, separadas por ponto e vírgula.
Fluoresce	Excitação, emissão e rendimento relativo.
dn/dc e Volatilidade	Resposta no índice de refração e no ELSD.
Retém em HILIC/amino	Para compostos muito polares.

Calibrar com corridas reais

1. Faça **duas corridas isocráticas** do composto em C18, com acetonitrila, perto de 30 °C, em duas porcentagens de orgânico (por exemplo, 40% e 60%).
2. Anote os tempos de retenção e o tempo morto (t_0).
3. No cadastro, clique em [Calibrar com duas corridas reais...](#), informe os valores e salve. A retenção passa a constar como *Ajustado*.

Colunas

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto: **Exemplo — Parabéns**

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho
Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Compostos **Colunas** Solventes Aditivos e tampões Fases móveis salvas Sistemas

Buscar coluna, fase ou código USP (ex.: bifenil, L11, 2.1) Fabricante: Todos os fabricantes Modo: Todos os modos 276 de 276 colunas

Coluna	Fabricante	Fase	Modo	USP	L (mm)	d.i. (mm)	dp (µm)	Volu...
C18 150 × 4,6 mm, 5 µm	Genérica	C18	Fase reversa		150	4,6	5,0	
C18 250 × 4,6 mm, 5 µm	Genérica	C18	Fase reversa		250	4,6	5,0	
C18 100 × 4,6 mm, 3,5 µm	Genérica	C18	Fase reversa		100	4,6	3,5	
C18 base desativada 150 × 4,6 mm, 5 µm	Genérica	C18 base desativada	Fase reversa		150	4,6	5,0	
C8 150 × 4,6 mm, 5 µm	Genérica	C8	Fase reversa		150	4,6	5,0	
Fenil-hexil 150 × 4,6 mm, 3,5 µm	Genérica	Fenil-hexil	Fase reversa		150	4,6	3,5	
Ciano 150 × 4,6 mm, 5 µm	Genérica	Ciano (RP)	Fase reversa		150	4,6	5,0	
C18 polar embutido 150 × 4,6 mm, 3,5 µm	Genérica	C18 polar embutido	Fase reversa		150	4,6	3,5	
C18 tipo A 250 × 4,6 mm, 10 µm	Genérica	C18 sílica tipo A (an...	Fase reversa		250	4,6	10,0	
C18 núcleo fundido 100 × 3,0 mm, 2,7 µm	Genérica	C18	Fase reversa		100	3,0	2,7	
C18 núcleo fundido 50 × 2,1 mm, 2,7 µm	Genérica	C18	Fase reversa		50	2,1	2,7	
C18 75 × 3,0 mm, 2,5 µm	Genérica	C18	Fase reversa		75	3,0	2,5	
C18 50 × 2,1 mm, 1,7 µm	Genérica	C18	Fase reversa		50	2,1	1,7	
C18 100 × 2,1 mm, 1,7 µm	Genérica	C18	Fase reversa		100	2,1	1,7	
C8 50 × 2,1 mm, 1,7 µm	Genérica	C8	Fase reversa		50	2,1	1,7	
Fenil 100 × 2,1 mm, 1,7 µm	Genérica	Fenil-hexil	Fase reversa		100	2,1	1,7	
Amino 250 × 4,6 mm, 5 µm (carboidratos)	Genérica	Amino	Normal ou HI...		250	4,6	5,0	
HILIC amida 100 × 2,1 mm, 1,7 µm	Genérica	HILIC amida	HILIC		100	2,1	1,7	
Sílica 250 × 4,6 mm, 5 µm (fase normal)	Genérica	Sílica (NP)	Normal ou HI...		250	4,6	5,0	
Sílica 150 × 4,6 mm, 3 µm (fase normal)	Genérica	Sílica (NP)	Normal ou HI...		150	4,6	3,0	

+ Nova coluna Abrir / editar Excluir

Dimensões e limites tirados do material público dos fabricantes; confira na ficha da sua coluna.

Biblioteca de colunas, com filtros por fabricante e por modo.

São 276 colunas: 22 genéricas (modelos sem marca) e 254 comerciais de Waters, Agilent, Phenomenex, Thermo, Merck, Supelco, Shimadzu, GL Sciences, YMC, Macherey-Nagel, Restek, Tosoh, Kromasil, ACE e Shodex. A busca aceita nome, fase ou código USP (L1, L7, L11...). A coluna *Dados* informa se as especificações foram **conferidas** no material do fabricante ou são **parciais** (dimensões conferidas; limites de pressão, pH ou temperatura típicos da linha). Confira sempre na ficha da sua coluna.

Em [+ Nova coluna](#) cadastre a sua: nome, fabricante, fase, dimensões, partícula, limites e **estado** (1 = nova; 0,5 = metade dos pratos, para simular coluna gasta).

Solventes

Início

Projeto

Executar amostras

Revisar dados

Desenvolver método

Biblioteca

Administração

Projeto aberto:
Exemplo — Parabens

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho
Administrador · breno

Manual (F1)

Sair da sessão

Compostos

Colunas

Solventes

Aditivos e tampões

Fases móveis salvas

Sistemas

Solvente	Uso	Força fase reversa	Força fase normal	Viscosidade (cP)	Corte de UV
Água / tampão aquoso	Reversa e HILIC	0,00	6,00	0,89	
Acetonitrila	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,00	0,50	0,37	
Metanol	Reversa, HILIC e modificador em normal	0,78	2,00	0,54	
Etanol	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,16	1,30	1,07	
Isopropanol (2-propanol)	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,35	1,00	2,04	
Tetraidrofurano (THF)	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,42	0,30	0,46	
Acetona	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,10	0,35	0,31	
1,4-Dioxano	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,13	0,30	1,18	
n-Hexano	Fase normal	—	0,00	0,30	
n-Heptano	Fase normal	—	0,00	0,39	
Isotano	Fase normal	—	0,00	0,47	
Ciclo-hexano	Fase normal	—	0,00	0,89	
Tolueno	Fase normal	—	0,02	0,56	
Diclorometano	Fase normal	—	0,08	0,41	
Clorofórmio	Fase normal	—	0,06	0,54	
Éter metil-terc-butilico (MTBE)	Fase normal	—	0,12	0,27	
Acetato de etila	Fase normal	—	0,25	0,43	
n-Propanol	Reversa, HILIC e modificador em normal	1,30	1,10	1,96	

+ Novo solvente

Abrir / editar

Duplicar

Excluir

Solventes dos canais A a D da bomba.
Os de fábrica não podem ser alterados:
use Duplicar.

Predefinição "Fosfato pH 6 / propanol" salva. Ela aparece na lista como "Minha: Fosfato pH 6 / propanol".

Aba Solventes: os de fábrica e os cadastrados pelo usuário.

A aba *Solventes* lista o que pode ser escolhido nos canais A a D. Para cadastrar um solvente novo, clique em **+ Novo solvente**; para partir de um parecido, selecione-o e clique em **Duplicar**. Os de fábrica não podem ser alterados nem excluídos.

Nome:

Tipo:

Miscível com água (fase reversa, HILIC e modificador em fase normal)

Força em fase reversa:

1.30 × acetonitrila

Força em fase normal:

1.10 × isopropanol

Viscosidade a 25 °C:

1.96 cP

Excesso de viscosidade com água:

2.5

Índice de refração:

1.3850

Corte de UV:

210 nm

Massa molar:

60.10 g/mol

Densidade:

0.803 g/mL

☐ Hidrocarboneto alifático (não se mistura com acetonitrila)

Observação:

Os valores vêm da ficha do solvente ou de tabelas de literatura. As forças de eluição são relativas e definem para que lado a retenção vai; ajuste-as comparando com uma corrida real.

Salvar solvente

Fechar

Cadastro de um solvente.

Campo	Significado
Tipo	Miscível com água (como metanol e acetonitrila) ou apolar , que não pode ir com água e só serve em fase normal.
Força em fase reversa	Em relação à acetonitrila (= 1,00). Metanol ≈ 0,78; etanol ≈ 1,16; isopropanol ≈ 1,35; THF ≈ 1,42.

Força em fase normal	Em relação ao isopropanol (= 1,00). Hexano = 0; diclorometano ≈ 0,08; acetato de etila ≈ 0,25; metanol ≈ 2,0.
Viscosidade	Do solvente puro a 25 °C. Entra na pressão e na largura dos picos.
Excesso de viscosidade com água	Quanto a mistura com água fica mais viscosa que os dois puros (acetonitrila 1,8; metanol 3,3).
Índice de refração, corte de UV, massa molar, densidade	Da ficha do solvente.
Hidrocarboneto alifático	Marque para alcanos: o programa recusa a mistura com acetonitrila.

As forças de eluição são relativas e definem para que lado a retenção vai. Se não souber o valor, comece pelo de um solvente parecido e ajuste comparando com uma corrida real.

Aditivos e tampões

Nome:

pH:

Corte de UV:

☐ Volátil (pode ser usado com ELSD)

Observação:

Cadastro de um aditivo ou tampão.

A aba *Aditivos e tampões* lista o que pode ser escolhido quando o canal é aquoso. No cadastro informe o nome (com concentração e pH), o **pH** da solução pronta, o **corte de UV** e se é **volátil** (tampões de fosfato, citrato, borato e sais de par iônico não são, e não servem para ELSD).

Fases móveis salvas

Lista as predefinições que você salvou na tela Desenvolver método, com o conteúdo de cada canal. Aqui elas podem ser excluídas.

Ao excluir um solvente ou aditivo seu, o programa mostra quais métodos o usam. Esses métodos deixam de rodar até você escolher outro solvente ou cadastrar o item de novo.

Sistemas

A aba *Sistemas* mostra as características dos três equipamentos virtuais (capítulo 16). Eles são fixos.

14. Dados reais do Empower: importar e exportar

(Importar e exportar arquivos do Empower faz parte da edição Completa.) O caminho para trabalhar com dados de um equipamento real é exportá-los no Empower e importá-los aqui: *Projeto* ► *Importar do Empower...*.

Formato	Como é gerado	O que vem
ARW / TXT / CSV	Exportação de dados brutos em texto (uma coluna de tempo e uma de sinal, com ou sem cabeçalho).	O cromatograma 2D e os dados do cabeçalho que existirem (amostra, canal, data).
AIA / ANDI (.cdf)	Exportação AIA do Empower ou de outros sistemas de dados.	O cromatograma 2D, a taxa e os dados da amostra.
Backup de projeto	Pasta do backup de projeto, com o arquivo .EXP e os d####.dat.	Os cromatogramas 2D e a identificação das amostras e dos frascos.

A leitura do backup de projeto é **parcial**: são lidos os dados brutos 2D e a identificação das injeções. Métodos, resultados, curvas e dados 3D de PDA do Empower **não** são convertidos. Sempre que possível, prefira ARW ou AIA.

Depois de importados, os canais aparecem em *Projeto* ► *Canais* com a origem “Importado” e são processados como os demais: crie um método de processamento, ajuste a função de cada injeção em *Injeções* ► *Alterar dados da amostra...* (padrões com as quantidades, amostras com peso e diluição) e processe.

Importação automática (pasta vigiada)

Pasta: C:\Empower\Exportados\Parabenos Escolher...

☒ Vigiar esta pasta e importar sozinho os arquivos novos
☐ Incluir as subpastas
☐ Importar também os arquivos que já estão na pasta agora

Importar como: Amostra ▼

Processar com: (não processar) ▼

Importados até agora: 0

No Empower, exporte os canais (File ► Export, ou um método de exportação no method set) para esta pasta.
Um arquivo só é importado quando para de mudar, isto é, quando o outro programa terminou de gravá-lo.
Os arquivos não são apagados nem movidos. O mesmo arquivo não é importado duas vezes.

Salvar Fechar

Configuração da pasta vigiada do projeto.

Em *Projeto* ► *Importação automática...* indique uma pasta e marque *Vigiar esta pasta*. A partir daí, todo arquivo .arw, .txt, .csv ou .cdf que aparecer nela é importado sozinho para o projeto. O uso típico é deixar o Empower exportando para essa pasta ao fim de cada injeção: os cromatogramas entram no Croma Science sem ninguém clicar.

Opção	Para que serve
-------	----------------

Incluir as subpastas	Olha também dentro das subpastas.
Importar também os arquivos que já estão na pasta	Desmarcada, só entram os arquivos que chegarem depois de ligar.
Importar como	Função dada às injeções (Amostra, Padrão...). Pode ser corrigida depois.
Processar com	Método de processamento aplicado logo depois de importar, usando as curvas que já existem.

- A pasta é conferida a cada 5 segundos, **com o programa aberto** e um usuário com permissão de aquisição na sessão. Durante uma corrida em *Executar amostras* a conferência espera.
- Um arquivo só é importado quando para de mudar, ou seja, quando o outro programa terminou de gravá-lo.
- Os arquivos **não são apagados nem movidos**, e o mesmo arquivo não é importado duas vezes. Um arquivo regravado com outro conteúdo entra de novo, como nova injeção.
- Com a pasta ligada, o botão passa a mostrar *Importação automática: ligada*. Cada importação fica na trilha de auditoria, e a barra de baixo da janela avisa quantos cromatogramas entraram.

Exportar: em *Canais* ► Exportar canais... ou em *Revisar dados* ► Exportar ▼, em ARW ou AIA, para abrir em outro programa.

15. Administração, usuários e auditoria

**CROMA
SCIENCE**

[Início](#)
[Projeto](#)
[Executar amostras](#)
[Revisar dados](#)
[Desenvolver método](#)
[Biblioteca](#)
Administração

Projeto aberto:
Exemplo — Parabenos

Teste: 30 dia(s) restante(s)

Breno Carvalho
Administrador - breno

[Manual \(F1\)](#)

[Sair da sessão](#)

[Usuários...](#)[Trocar minha senha...](#)[Verificar integridade dos dados](#)[Fazer cópia de segurança...](#)[Restaurar cópia...](#)

[Licença...](#)[Manual \(F1\)](#)[Sobre](#)

Período de teste: restam 30 dia(s), com todas as funções.
Banco de dados: /tmp/tmplimuh7yn/CromaScience/croma.db (7.9 MB) · última cópia de segurança: nunca

Trilha de auditoria (todos os projetos e o sistema)

[Exportar \(PDF\)...](#)[Exportar \(Excel\)...](#)

Nº	Data e hora	Usuário	Projeto	Ação	Objeto
71	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Branco — PDA 254 nm @ 4.8 nm resultado nº 22, ver
70	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Padrão N1 — PDA 254 nm @ 4.8... resultado nº 21, ver
69	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Padrão N3 — PDA 254 nm @ 4.8... resultado nº 20, ver
68	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Padrão N5 — PDA 254 nm @ 4.8... resultado nº 19, ver
67	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Creme lote 01 — PDA 254 nm @... resultado nº 18, ver
66	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Resultado salvo	Creme lote 01 — PDA 254 nm @... resultado nº 17, ver
65	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Curva de calibração gerada	Butilparabeno (Parabenos — do... versão 2, Linear, 3 p
64	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Curva de calibração gerada	Propilparabeno (Parabenos — d... versão 2, Linear, 3 p
63	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Curva de calibração gerada	Etilparabeno (Parabenos — dos... versão 2, Linear, 3 p
62	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Curva de calibração gerada	Metilparabeno (Parabenos — do... versão 2, Linear, 3 p
61	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Sample set concluído	Doseamento lote 01
60	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Creme lote 01 2 canal(is): PDA 210
59	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Creme lote 01 2 canal(is): PDA 210
58	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Padrão N5 2 canal(is): PDA 210
57	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Padrão N3 2 canal(is): PDA 210
56	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Padrão N1 2 canal(is): PDA 210
55	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Injeção adquirida	Branco 2 canal(is): PDA 210
54	07/10/2026 21:21:...	breno	Exemplo — Parabenos	Sample set iniciado	Doseamento lote 01 HPLC

Pronto

Administração: trilha de auditoria de todo o sistema.

Usuários e perfis

Perfil	Podê
Administrador	Tudo: usuários, projetos, biblioteca, métodos, aquisição, processamento, assinatura e aprovação, cópia de segurança.
Analista	Biblioteca, métodos, aquisição, processamento, assinatura e exportação.
Visualizador	Só consultar e exportar.

Em **Usuários...** o administrador cria usuários, muda perfis, desativa, troca senhas e desbloqueia contas. As senhas são guardadas de forma irreversível.

Trilha de auditoria

Toda ação que cria, altera ou exclui algo é registrada com data e hora, usuário, objeto, detalhe e motivo. Os registros são encadeados: alterar ou apagar um registro antigo quebra a cadeia e é detectado. A trilha pode ser filtrada e exportada em PDF ou Excel.

Integridade, cópia de segurança e licença

- Verificar integridade dos dados**: confere a cadeia da auditoria e se os dados brutos de cada canal continuam idênticos aos adquiridos (SHA-256).
- Fazer cópia de segurança...**: grava o banco inteiro num arquivo. Faça com frequência e guarde fora do computador.
- Restaurar cópia...**: substitui o banco atual por uma cópia.
- Licença...**, **Manual (F1)** e **Sobre**.

Os dados ficam em %APPDATA%\CromaScience , na conta do Windows de quem usa o programa.

16. Tabelas de referência

Sistemas virtuais

Sistema	Pressão máx.	Volume de atraso	Fluxo	Injeção máx.	Taxa máx.
HPLC (quaternária de baixa pressão)	345 bar	1,00 mL	0,05 a 10 mL/min	100 µL	80 Hz
ARC (intermediário)	655 bar	0,70 mL	0,01 a 5 mL/min	50 µL	80 Hz
UPLC (binária de alta pressão)	1034 bar	0,12 mL	0,01 a 2 mL/min	10 µL	160 Hz

Solventes

Solvente	Uso	Corte de UV (nm)	Viscosidade (cP)	Observação
Água / tampão aquoso	Reversa e HILIC	190*	0,89	*O corte sobe conforme o aditivo.
Acetonitrila	Reversa e HILIC	190	0,37	Baixa pressão, bom para UV baixo.
Metanol	Reversa; modificador em normal	205	0,54	Misturado com água, a pressão sobe bastante.
Etanol	Reversa; modificador em normal	210	1,07	Alternativa menos tóxica.
Isopropanol	Reversa; modificador em normal	205	2,04	Muito viscoso; forte.
Tetraidrofurano (THF)	Reversa	212	0,46	Muda a seletividade; ataca PEEK.
Acetona	Reversa	330	0,31	Inviável com UV baixo.
1,4-Dioxano	Reversa	215	1,18	
n-Hexano	Normal (fraco)	195	0,30	Imiscível com água e acetonitrila.
n-Heptano	Normal (fraco)	200	0,39	Substituto menos tóxico do hexano.
Isoctano	Normal (fraco)	215	0,47	
Ciclo-hexano	Normal (fraco)	200	0,89	
Tolueno	Normal	284	0,56	Corte alto.
Diclorometano	Normal	233	0,41	
Clorofórmio	Normal	245	0,54	
MTBE	Normal	210	0,27	
Acetato de etila	Normal (forte)	256	0,43	Corte alto: use $\lambda \geq 260$ nm.

Aditivos e tampões do canal aquoso

Aditivo	pH	Volátil (serve para ELSD)
Água pura	7,0	sim
Ácido fórmico 0,1%	2,7	sim
TFA 0,1%	2,0	sim
Ácido acético 0,1% / 1%	3,2 / 2,8	sim
Ácido fosfórico 0,1%	2,1	não
Tampão fosfato 25 mM pH 2,5 / 20 mM pH 3,0 / 20 mM pH 7,0	2,5 / 3,0 / 7,0	não
Fosfato + trietilamina 0,1%	3,0	não
Formiato de amônio 10 mM	3,8	sim
Tampão acetato 20 mM	4,5	sim
Acetato de amônio 10 mM	6,8	sim
Tampão citrato 20 mM	3,5	não
Bicarbonato de amônio 10 mM	10,0	sim
Hidróxido de amônio 0,1%	10,5	sim
Tampão borato 20 mM	9,0	não
Ácido perclórico 0,1%	1,9	não
Fosfato pH 2,5 + octanossulfonato 5 mM (par iônico)	2,5	não

A volatilidade de cada aditivo é a que o programa usa para avisar sobre o ELSD; confirme na aba Avisos da tela Desenvolver método.

17. Problemas comuns

O que aparece	Causa provável	O que fazer
“Pressão prevista acima do limite”	Partícula pequena, fluxo alto ou solvente viscoso para aquele sistema.	Reduza o fluxo, aqueça a coluna, use partícula maior ou troque o sistema.
“Não se misturam”	Água com solvente apolar, ou acetonitrila com alceno.	Use só solventes miscíveis. Em fase normal, sem água.
“O canal está marcado como não usar, mas tem %”	A tabela de gradiente dá porcentagem a um canal desligado.	Zere a coluna do canal ou escolha um solvente para ele.
“A soma é diferente de 100%”	Linha do gradiente mal preenchida.	Corrija as porcentagens da linha indicada.
Nenhum pico no cromatograma	Composto sem cromóforo no UV; λ errado; composto não elui na corrida; branco.	Veja a aba Avisos e a tabela de picos previstos. Troque o detector ou o λ , aumente o solvente forte ou o tempo.
Picos no tempo morto	Fase móvel forte demais ou modo errado (composto apolar em fase normal, polar em fase reversa).	Reduza o solvente forte ou troque de modo.
Linha de base subindo no gradiente	λ perto do corte de UV do solvente ou do aditivo.	Aumente o λ ou troque o solvente ou o aditivo.
Padrão fora da curva ou amostra “fora da curva”	Concentração fora da faixa dos padrões.	Dilua a amostra ou acrescente níveis.
“Faz parte da edição Completa”	Função fora da edição Básica.	Atualize a licença.
“Usa um solvente que não está mais cadastrado”	O solvente ou aditivo do método foi excluído da Biblioteca.	Escolha outro no método ou cadastre-o de novo.
“Não foi possível abrir a porta”	Caixa A/D desligada, porta errada ou em uso por outro programa (o monitor serial do Arduino, por exemplo).	Feche o outro programa, clique em Atualizar e escolha a porta certa.
Caixa A/D: “Porta aberta, mas a caixa não se identificou”	Firmware diferente ou placa ainda reiniciando.	Desconecte e conecte de novo. Se a placa envia leituras sem esperar comando, a gravação funciona assim mesmo.
Picos cortados no topo na aquisição real	O sinal passou da faixa de entrada da caixa.	Escolha uma faixa maior ou reduza a escala da saída analógica do detector.
A pasta vigiada não importa	Programa fechado, usuário sem permissão, pasta fora do ar ou arquivo com outra extensão.	Veja os arquivos recusados em Importação automática...
Detector indisponível	Edição Básica da licença.	Use UV/Vis ou atualize para a Completa.
Período de teste encerrado	Passaram os 30 dias.	Administração ► Licença... e ative com a chave.
Conta bloqueada	Cinco senhas erradas.	O administrador desbloqueia em Usuários....

18. Limites do modelo

Para usar bem o programa é preciso saber o que ele calcula e onde ele simplifica.

- **Retenção em fase reversa:** modelo de força linear do solvente ($\log k = \log k_w - S \cdot \phi$), com efeito de pH para um grupo ionizável, de temperatura e de seletividade da fase. Compostos com mais de um grupo ionizável (anfóteros, zwitterions) são tratados pelo grupo principal.
- **Retenção em fase normal:** é uma **estimativa pela polaridade** do composto, calculada a partir do $\log P$. Reproduz a tendência (polares retêm mais, mais álcool elui antes), não a seletividade fina.
- **HILIC:** só os compostos marcados como retidos em HILIC têm parâmetros próprios; os demais saem perto do tempo morto.
- **Biblioteca:** 535 dos 583 compostos têm a retenção estimada pelo $\log P$. Pares críticos reais podem não aparecer como críticos, e o contrário. Separações quirais, de isômeros de posição e de troca iônica não são modeladas.
- **Eficiência e forma do pico:** equação de Knox, dispersão extracolumna, cauda exponencial e sobrecarga de massa. Colunas reais variam com a idade e o lote.
- **Pressão:** Kozeny-Carman com a viscosidade da mistura. Costuma acertar a ordem de grandeza; conexões, filtros e pré-colunas não entram.
- **Detectores:** Lambert-Beer para UV e PDA, resposta relativa para fluorescência, dn/dc para índice de refração e lei de potência para ELSD. As absorptividades da maior parte da biblioteca são aproximadas.
- **Solventes e aditivos do usuário:** entram no modelo pelos números informados no cadastro. As forças de eluição são relativas; um valor errado desloca todos os tempos.
- **Aquisição pela caixa A/D:** a resolução é de 16 bits e depende da faixa escolhida; é menor que a da saída digital de um detector moderno. O tempo de cada leitura vem do relógio da placa.
- **Colunas comerciais:** dimensões e limites vêm do material público dos fabricantes; a seletividade usa a classe da fase (C18, fenil, PFP...), sem diferenciar marcas da mesma classe.

Use a simulação para **planejar e aprender**. A decisão sobre um método analítico depende de corridas reais e de validação. O programa não foi validado para uso em ambiente regulado, e não foi testado em todas as versões do Windows.