



1. Objetivo

Describir los pasos necesarios para la operación y mantenimiento del espectrofotómetro FTIR Affinity 1S y su software LabSolutions IR.

2. Alcance

Este instructivo describe la operación y precauciones de uso para el FTIR Affinity 1S; manejo del software LabSolutions IR para la ejecución de métodos cualitativos y cuantitativos, y la gestión de información generada por el instrumento.

3. Definiciones

- **Apodización:** Función empleada para reducir el submáximo de la señal analítica después de aplicada la transformada de Fourier. Dentro de los parámetros de Apodización están: Box Car, Triangular, Triangular cuadrado, Bessel, Cos y Happ. Cuando se requiere una alta resolución se recomienda Boxc Car y Happ-Genzel o Triangular cuadrado en los casos donde no se requiere.
- **Beam Splitter:** El BeamSplitter o divisor de Haz, es una pieza hecha de KBr con Ge ocluido, que permite dividir un rayo de radiación electromagnética en dos.
- **Línea de fondo:** Background en inglés. Corresponde a la señal del instrumento sin la muestra presente. Puede emplearse el dispositivo vacío (aire), el dispositivo con la celda vacía o la matriz de disolución de la muestra (solvente).
- **Número de onda (cm-1):** El número de onda es una magnitud de frecuencia que indica el número de veces que vibra una onda por unidad de distancia.

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

- **FTIR:** Fourier Transform Infrared o Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier, es una técnica de medición que permite traducir el patrón de transmisión o interferograma a un espectro infrarrojo.
- **Poliestireno:** Es un polímero termoplástico que se obtiene de la polimerización del monómero estireno, que, por su alta estabilidad y características estructurales, es empleado en la verificación y ajuste de los instrumentos infrarrojo.

4. Siglas

No aplica

5. Documentos relacionados en el SGI

SLC-F007 Formato control diario del manejo de equipos.

6. Descripción general de la actividad

6.1 Aspectos de seguridad y salud en el trabajo

Riesgo de Explosión: Tenga en cuenta que en la mayoría de aplicaciones de interés analítico se requiere el uso extensivo de solventes orgánicos que pueden ser inflamables. El instrumento cuenta con partes eléctricamente activas incluso después de ser apagado. No deje material inflamable cerca del instrumento.

Riesgo de Intoxicación: Procure que el área de trabajo este ventilada cuando trabaja con solventes orgánicos. Esto es especialmente importante cuando se trabaja con solventes tóxicos, sin embargo, existe un riesgo de desplazamiento de oxígeno (hipoxia) por lo que en cualquier caso se debe tener una constante circulación de aire, sin importar la naturaleza del solvente.

Riesgo de afectación por contacto: La medición de muestras en el instrumento requiere la transferencia de solventes y patrones a las cubetas de

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

cuarzo destinadas para este fin. Para evitar contaminación durante este procedimiento se recomienda el uso de elementos de protección personal. En especial bata, guantes de nitrilo y gafas de seguridad.

Riesgo de daño por generación de hidruros de halógenos: Al trabajar con solventes halogenados como difluorometano (CH_2F_2), Diclorometano (CH_2Cl_2), Cloroformo (CHCl_3), Tetracloruro de Carbono (CCl_4), se debe considerar la potencial generación de los hidruros altamente corrosivos HF y HCl en el compartimiento del interferómetro, lo que puede dañar los lentes y otros elementos ópticos, tornillos y otras partes del instrumento. Para evitar la entrada de estos compuestos se debe tener una adecuada ventilación o purgar con aire seco o nitrógeno cuando se incluya muestras que usen estos solventes.

6.1 Equipos, reactivos y materiales

6.1.1 Equipos

Equipo Shimadzu AffinitIR 1S

6.1.2 Materiales

Cubetas de cuarzo

6.2 Limitaciones e interferencias

El instrumento está limitado al rango de infrarrojo mediano comprendido entre 4000 y 400 cm^{-1} . A continuación se ejemplifican errores comunes en el instrumento que pueden llegar a interferir con su adecuada operación, así como sus causas y posibles soluciones:

Tabla 1. Errores comunes y su posible solución

Mensaje de error	Significado	Solución
Ninguno de las corridas de línea de fondo (background) corresponde a los parámetros de la muestra.	No hay línea de fondo almacenada que corresponda a la muestra medida (%T o Abs).	Medir una línea de fondo con los parámetros de la muestra
No se puede abrir el archivo	El archivo que se quiere abrir puede estar como "solo lectura" Si es así el archivo no se podrá abrir. Si no es así el contenido del archivo puede estar destruido.	Repetir la captura de datos.
XXX (nombre archivo) ya existe por favor seleccione otro.	Cuando está en modo GLP está prohibido sobrescribir archivos.	Cambie el nombre y grabe nuevamente.
XXX a XXXX número de onda debe ser incluido	El rango de números de onda esta fuera del rango del beam splitter instalado.	Introduzca un rango correcto.
Errores mostrados en la ventana de Status		
Mensaje de error	Significado	Solución
No Background spectrum! Measurement aborted	No hay línea de fondo almacenada que corresponda a la muestra medida (%T o Abs).	Siempre que cambie las condiciones de toma de muestras se debe volver a hacer el background



Servicios Laboratorio de Calidad
Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity

Código: SLC-I091
Versión: 03
Fecha: 03/03/2026

Mensaje de error	Significado	Solución
Parameter check error	Hay una discordancia en la información de los parámetros de la medida.	Verifique los parámetros y corríjalos.
Diagnostic Power measurement failed	La verificación de la forma del espectro de poder ha fallado.	Ejecute [measurement]-[Auto Adjust] e inténtelo de nuevo.
Could not retrieve diagnostic power results	La verificación de la forma del espectro de poder no pudo ser completada.	Ejecute [measurement]-[Auto Adjust] e inténtelo de nuevo.
Piezo voltage is out of range	La verificación del voltaje del piezo en el diagnóstico ha fallado.	Ejecute [measurement]-[Auto Adjust] e inténtelo de nuevo.
Piezo voltage can not be obtained	La verificación del voltaje del piezo en el diagnóstico ha fallado.	Ejecute [measurement]-[Auto Adjust] e inténtelo de nuevo.
Not enough memory available! Out of memory	La memory disponible en el PC es insuficiente.	Si está usando otra aplicación ciérrela y reinicie el PC.
Failure of mirror drive in the interferometer	El espejo móvil ha fallado	Ejecute [measurement]-[Auto Adjust] e inténtelo de nuevo.

Fuente: Elaboración Propia. 2025

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

6.2.1 Condiciones ambientales

El equipo debe operarse entre 15 y 30°C y la humedad debe ser 70% o menor.

6.3 Control y aseguramiento de la calidad analítica

El instrumento debe encenderse al menos una hora antes de iniciar su uso para estabilizar la energía de la fuente. El programa Labsolutions IR cuenta con un modo de verificación inicial, llamado inicialización, para garantizar que el instrumento se encuentra en condiciones óptimas para su operación. La inicialización se debe hacer mensualmente o cada vez que se haga una modificación significativa al instrumento.

Condiciones para inicializar el instrumento:

- Confirme que no hay nada interrumpiendo el haz de luz en el compartimiento del instrumento. Si hay algo interrumpiendo el haz, la forma del espectro de poder y otros chequeos fallarán.
- Seleccione [Measurement]-[initialize].
- En este momento el diagnostico automático es ejecutado y su resultado mostrado en la ventana de entradas (log window).
- Cualquier ítem que falle en el diagnostico será mostrado en la ventana de error como fallo (failure).
- Después de que todos los ítems son inspeccionados, un mensaje de "INIT SUCCESS" o iniciación exitosa aparece en la ventana de entradas. Después de esto el instrumento está listo para iniciar.
- **IMPORTANTE:** Para mover el equipo de su posición se debe asegurar la óptica. Moverlo sin este ajuste puede desajustarlo.

6.4 Desarrollo específico de la actividad

6.4.1 Principio del método

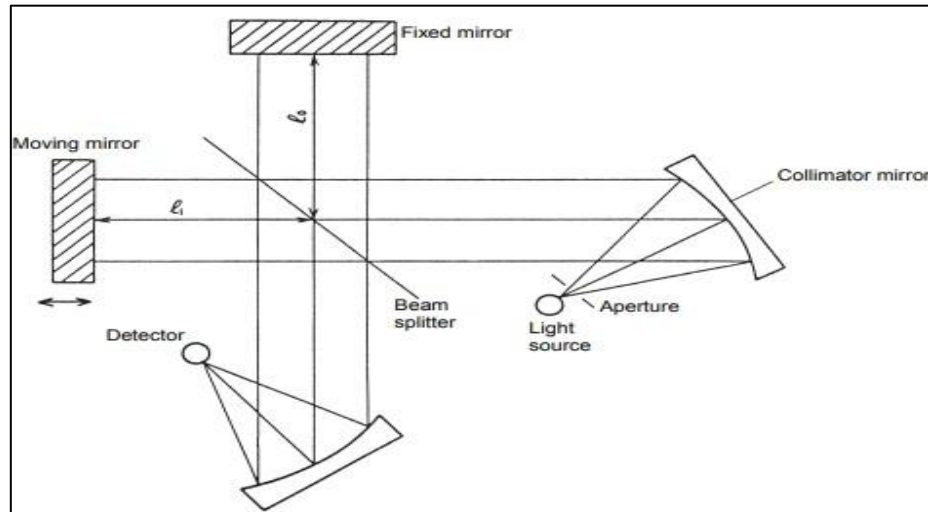
El espectrofotómetro infrarrojo con transformada de Fourier registra un interferograma para posteriormente hacer una transformación de Fourier de esta señal. El interferograma es medido con un interferómetro de Michelson (Ilustración 1), de la siguiente manera:

Después de pasar la apertura, una onda electromagnética de energía conocida es dirigida en un haz paralelo por un lente colimador que entra en un beam splitter, el cual consiste en un lente de bromuro de potasio con una capa depositada de Germanio, que divide el haz sencillo en dos, reflejando uno al espejo fijo y transmitiendo el otro al espejo móvil. Ambos espejos reflejan sus haces de vuelta al beam splitter y parte de cada haz es reflejado y transmitido. La luz transmitida del espejo fijo y la reflejada del espejo móvil se recombinan e interfieren la una con la otra mientras viajan hacia el espejo colector. La interferencia puede ser constructiva o destructiva.

Asumiendo que la fuente emite luz monocromática de longitud de onda λ (cm). Cuando la distancia l_1 entre el espejo fijo y el beam splitter es igual a la distancia l_2 entre el espejo móvil y el beam splitter, la diferencia entre el camino óptico de los dos haces de luz, $\chi=(l_1-l_2)$, es igual a cero, y los haces están en fase. Mientras están en fase, el haz interfiere constructivamente el uno con el otro.

A medida que el espejo móvil se desplaza a $\lambda/4$ cm, la diferencia de los caminos ópticos es de $\lambda/2$ cm, y los dos haces están fuera de fase, interfiriendo destructivamente. De esta forma, los dos haces interfieren constructivamente cuando $\chi=n \lambda$ y destructivamente cuando $\chi=(n+1/2) \lambda$ donde n es un entero.

Ilustración 1. Diagrama de interferómetro de Michelson



Fuente: Manual del instrumento

La ecuación 1, extrapolada de los principios mencionados anteriormente, calcula la intensidad $I^*(\chi)$ de luz (longitud de onda λ) incidente al detector:

Ilustración 2. Intensidad Interferométrica en Función de la Diferencia de Camino Óptico

$$I^*(\chi) = 4RT S(\lambda) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left(2\pi \frac{z}{\lambda} \right) \right)$$

Fuente: Manual del fabricante

Donde R es la energía reflejada por el beam splitter, T la energía transmitida por el beam splitter y $S(\lambda)$: energía radiada por la fuente.

La intensidad de la luz detectada por el detector es una función de la ecuación 1. $I(\chi)$ denota la intensidad de luz y el número de onda $\sigma(\text{cm}^{-1})$ reemplaza la longitud de onda λ .

Ilustración 3. Expresión de la Intensidad Interferométrica en Función del
Número de Onda

$$I(\chi) = 4RTS(\lambda) \frac{1}{2} \cos(2\pi\sigma\chi)$$

$$I(\chi) = B(\sigma) \cos(2\pi\sigma\chi)$$

$$\text{donde } B(\sigma) = 4RTS(\lambda) \frac{1}{2}$$

Fuente: Manual del fabricante

La señal $I(\chi)$ observada por el detector tiene el nombre de interferograma, y $4RT$ es nombrada como la eficiencia del beam splitter. Si la fuente emite luz policromática, $I(\chi)$ está dada por la integración de la ecuación 2 con respecto al número de onda.

6.4.2 Ejecución de la técnica

Antes de ejecutar cualquier medida tenga en cuenta las condiciones establecidas en el control y aseguramiento de calidad de este documento.

- Inicio – Deje calentar la fuente al menos 30 min antes de iniciar la medición.
- Inicialización – Cuando sea necesario según los criterios de aseguramiento de la calidad.
- Defina los parámetros del SCAN – Rango de análisis, número de scans.
- Ingrese el número de archivo y la información de la muestra.
- Medición de la línea de fondo – Emplee el medio adecuado para la medición de la línea de fondo.

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

- Medición de la muestra
- Postrun

Crear una curva de calibración y cuantificación de muestras desconocidas

- Inicio
- Inicialización
- Cree una tabla de estándares
- Introduzca los parámetros de la curva de calibración
- Cree la curva de calibración
- Seleccione los parámetros del SCAN
- Guarde la curva de calibración
- Prepare una tabla de muestras desconocidas
- Medición de la línea de fondo
- Haga la medición cuantitativa de las muestras desconocidas.
- Defina las condiciones del modelo de cuantificación (Post procesamiento)
- Cálculos

Búsqueda de espectros y algunos procesamientos para la búsqueda

- Preparación
- Seleccione una librería
- Seleccione un algoritmo
- Ejecute la búsqueda
- Procesamiento post-búsqueda
- Guardar
- Cerrar

Edición e impresión de informes.

- Preparación de datos
- Selección de ítems



- Verificación de propiedades

6.4.2.1. Consideraciones iniciales

Unidad de secado: Para mantener una señal libre de humedad en el camino óptico, el IRAffinity-1 mantiene el interior del interferómetro a baja humedad secándola incluso mientras el instrumento se encuentra fuera de uso. De acuerdo a esto se debe mantener el instrumento siempre conectado con una fuente de corriente alterna. Confirme que el led naranja (dry indicator) en la parte inferior derecha del equipo se encuentra prendida. Si se espera dejar sin suministro de energía al equipo por un largo periodo de tiempo se debe reemplazar la silica gel ubicada al lado de la cámara del interferómetro al menos una vez cada dos semanas.

Principio: El interferómetro del IRAffinity-1 usa un dehumidificador de ROSAHL®, como unidad de secado, el cual transporta la humedad del interferómetro al exterior del instrumento.

ROSAHL® es un deshumidificador que utiliza un polímero sólido electrolítico de membrana, para electrolíticamente descomponer y remover la humedad del aire.

Cuando un voltaje DC es aplicado a los electrodos porosos pegados a ambos lados de la membrana la humedad en el lado anódico (lado deshumidificado) se disocia en ion hidrógeno (H^+) y oxígeno, el ion de hidrógeno se mueve en la membrana hacia el cátodo hasta alcanzar el lado de descarga de humedad.

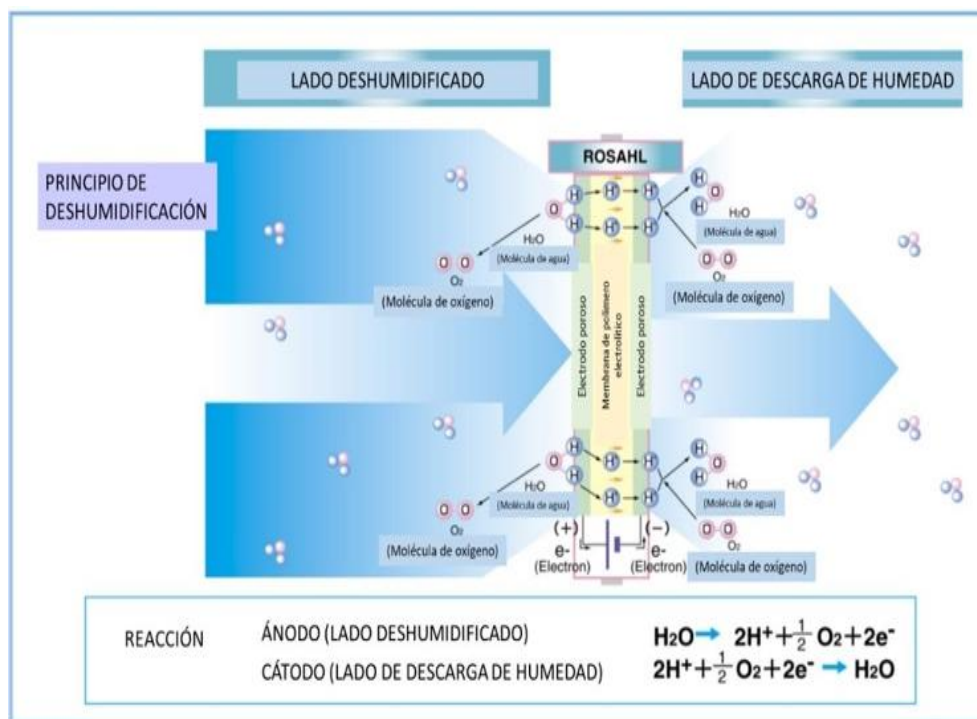
En el cátodo, el hidrógeno reacciona con el oxígeno del aire, resultando en moléculas de agua en estado gaseoso, la cual es descargada.

La unidad de secado está localizada dentro de la cubierta del IRAffinity-1 en la parte trasera. Las siguientes son las precauciones que debe tener cuando se use.

- Evite usar el instrumento en un sitio con pobre ventilación

- No exponga la membrana a agua líquida directamente.
- Evite usar el instrumento si hay partículas finas suspendidas u otras suspensiones.
- Evite el contacto con los electrodos de humidificación/des-humidificación.

Ilustración 4. Esquema de des-humificador incorporado el equipo.



Fuente: Manual del fabricante

No desarme el instrumento se puede presentar inconvenientes al rearmar.

6.4.2.2. Condiciones de inicialización

El instrumento cuenta con una opción para hacer una verificación del instrumento. Esta opción, llamada inicialización provee un "log" donde se puede identificar el estado de las distintas partes verificadas. La inicialización se debe

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

ejecutar cuando el instrumento se ha mantenido apagado por más de una semana o cuando se considere que es necesario hacer la verificación.

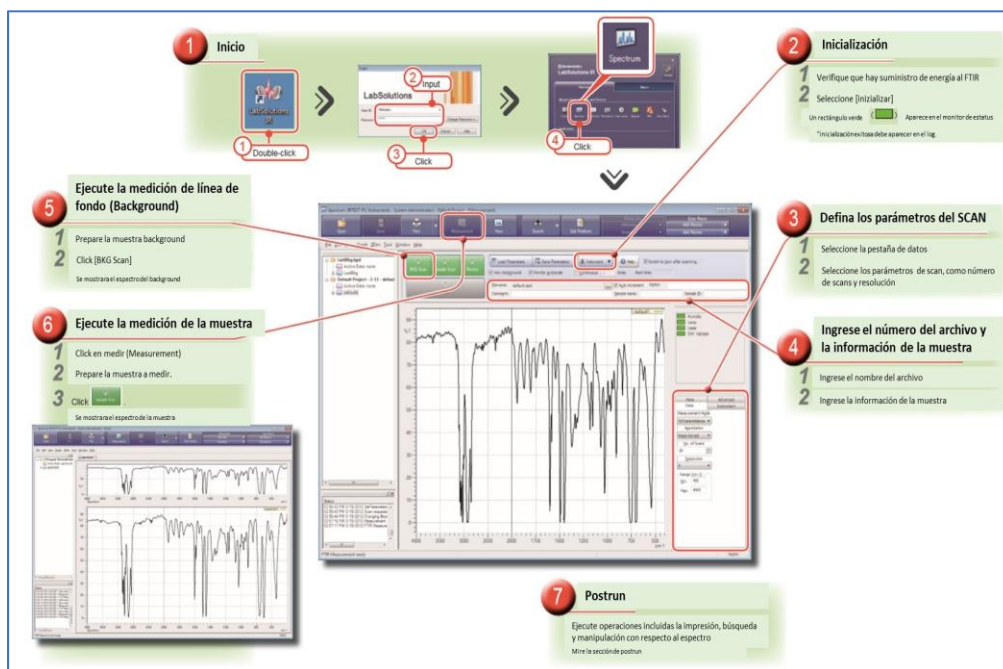
6.4.2.3. Opciones principales de uso del equipo

- Tomar espectros (SPECTRUM): Es la forma principal de hacer mediciones con el Affinity 1S. Muestras y patrones, sea para cuantificar o hacer una búsqueda en la biblioteca. La pestaña de espectro recoge la información relevante como rango de número de onda, número de escaneos, resolución entre otros. Ver ilustraciones de uso.
- Establecer una curva de calibración (QUANTITATION 1): Desde el menú de cuantificación se ingresa la información necesaria para establecer el modelo de calibración, incluyendo tipo de regresión, estándares de calibración, señal analítica, entre otras.
- Cuantificar muestras desconocidas (QUANTITATION 2): Después de contar con un modelo de calibración se puede hacer la lectura y posterior cuantificación de las muestras desconocidas desde la pestaña de cuantificación.
- Buscar espectros en la biblioteca (SEARCH): una aplicación bastante útil para identificar compuestos puros es la búsqueda de su espectro en las bibliotecas disponibles en el instrumento.
- Crear reportes y editar imprimibles (EDIT PRINTFORM): El programa provee una serie de ítems que pueden ser incluidos en los reportes

Otras aplicaciones: El programa LabSolutions IR cuenta con otras aplicaciones que se salen del alcance de este instructivo. Para mayor información consulte el manual de usuario.

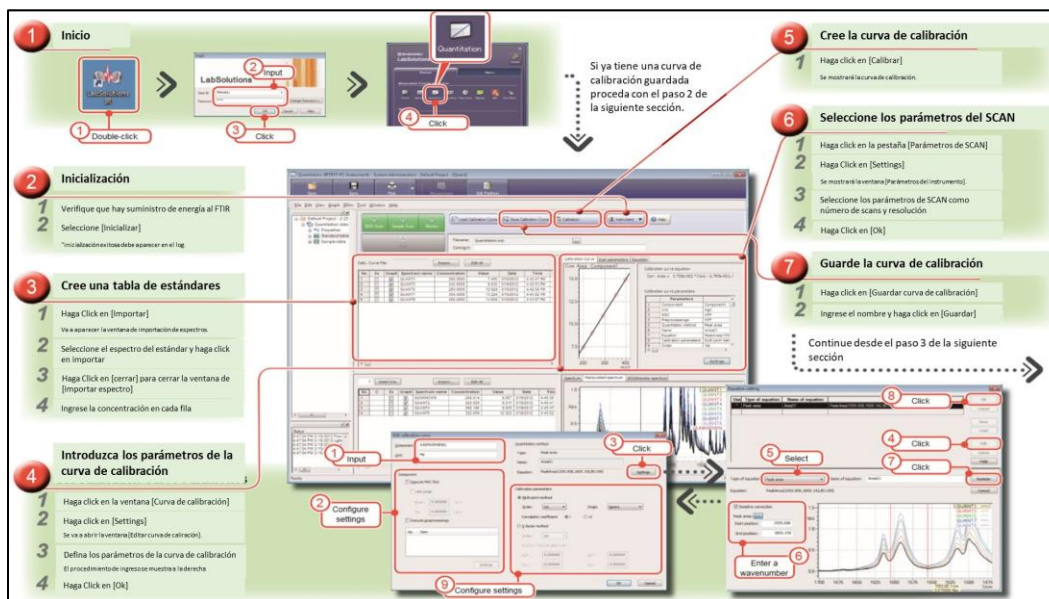
Las siguientes ilustraciones corresponden a los diagramas operativos de instrumento.

Ilustración 5. Medición de espectros



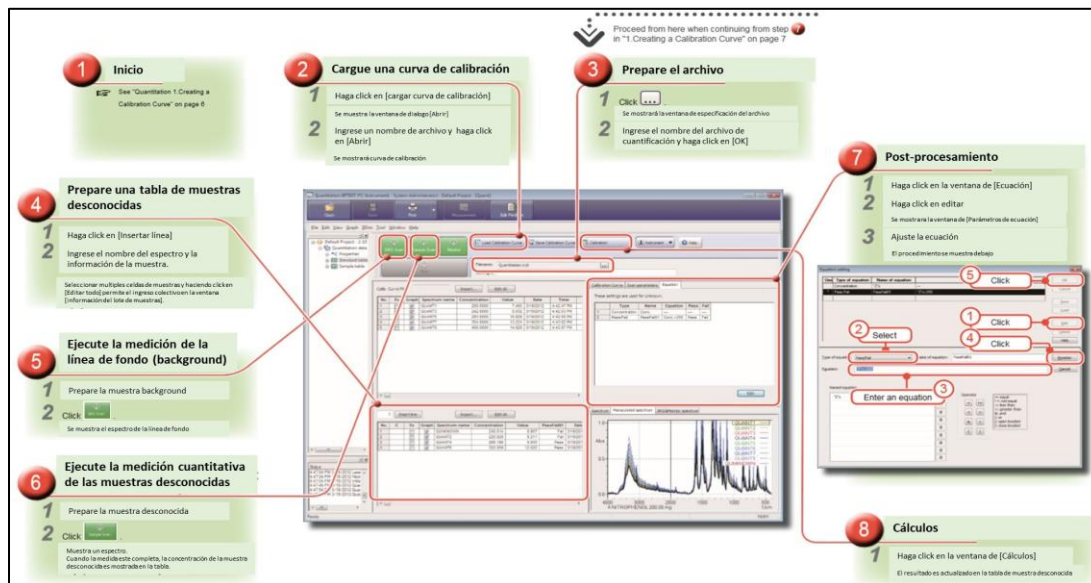
Fuente: Manual del fabricante 2025

Ilustración 6 Ventana para la cuantificación. Creación de curvas de calibración



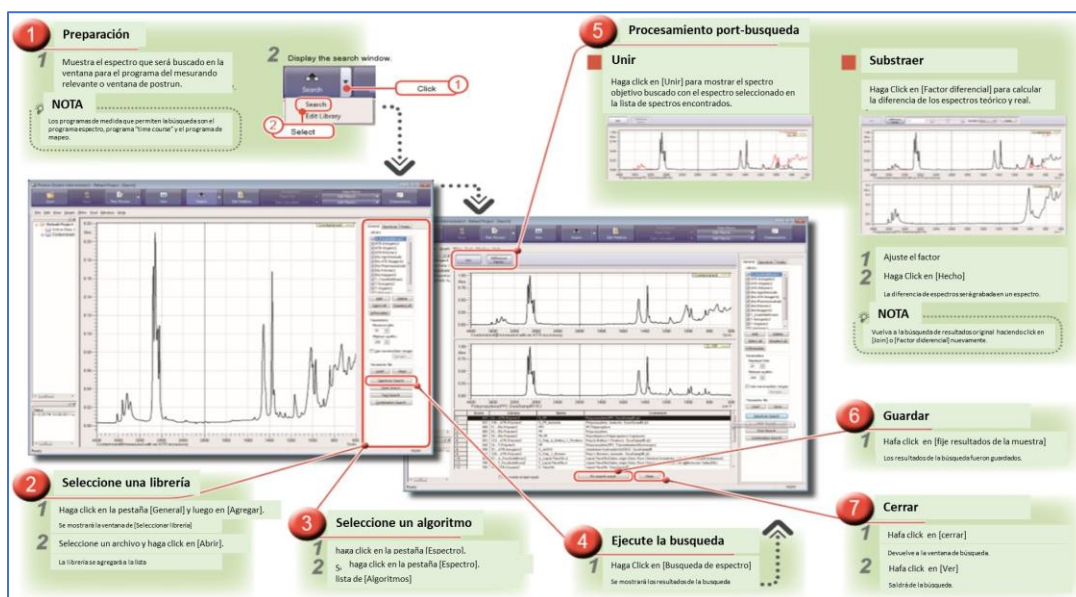
Fuente: Manual del fabricante 2025

Ilustración 7 Ventana para la cuantificación. Cuantificación de muestras desconocidas



Fuente: Manual del fabricante 2025

Ilustración 8 Búsqueda de espectros y algunos procesamientos para la búsqueda



Fuente: Manual del fabricante 2025

1 Preparación de datos

- Muestra los datos a imprimir en la ventana del programa de la medida o la ventana de deposición.

2 Muestra la ventana de editar imprimible



4 Registro

Imprimir se puede hacer más fácilmente registrando el reporte creado en la plantilla.

- Haga click en [Preferencias de impresión] en el menú [Herramienta]
- Registre el reporte de la plantilla

El procedimiento de registro se muestra a la derecha.

3 Seleccionar ítems

- Arrastre el elemento seleccionado a la ventana del reporte
- Mueva el cursor del ratón para ajustar el tamaño y luego haga click
- Ajuste la disposición del reporte

NOTA

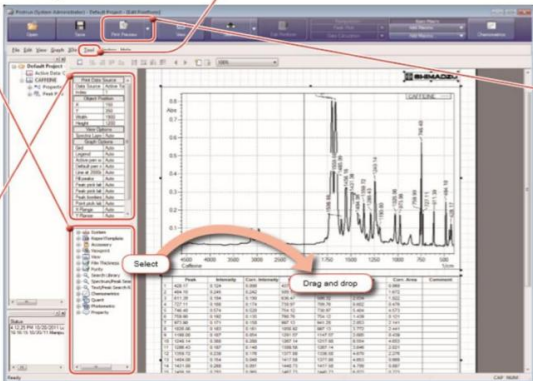
- Las partes del reporte en la ventana se mueven arrastrándose
- Estas partes pueden ser agrandadas o reducidas arrastrando los puntos en el marco que lo contiene.

5 Imprimir

- Selecione [Vista previa de impresión]
- Selecione [Imprimir] en la ventana de vista previa de impresión
- Ajuste cada ítem y haga click en [OK]

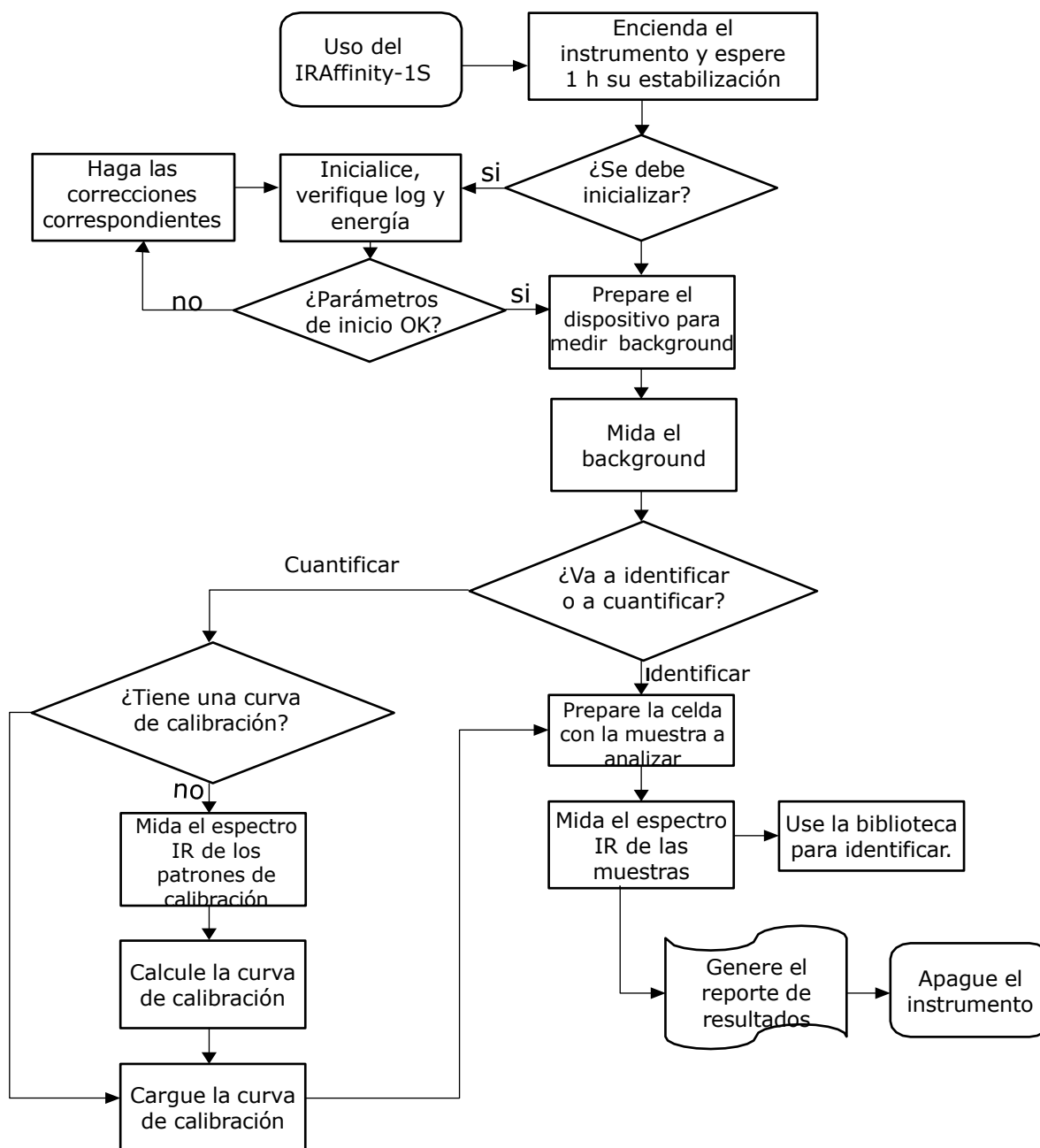
NOTA

Selecione [Imprimir] en la ventana de editor formato de edición sin revisar la salida usando vista previa de impresión



6.6. Diagrama

Diagrama 1. Descripción del manejo



Fuente: Elaboración propia 2025

	Servicios Laboratorio de Calidad Instructivo de manejo espectrofotómetro ftir affinity	Código: SLC-I091 Versión: 03 Fecha: 03/03/2026
---	---	--

6.7. Documentos relacionados

Instruction manual user system guide IRAffinity-1 Shimadzu Fourier transform infrared Spextrophotometer; Shimadzy, Kyoto Japón; enero 2009.

7. Control de cambios

VERSIÓN	FECHA	DESCRIPCIÓN
01	28/03/2022	Creación del documento
02	03/07/2025	Se actualiza el Formato de acuerdo con el memorando enviado por la OAP memorando 20251100097283 lineamientos para la actualización documental en el marco de la implementación del aplicativo suite visión. El código pasa de M-S-LC-I091 a SLC-I091.
03	03/03/2026	Actualización a la nueva plantilla de acuerdo con los lineamientos de la OAP